



FACULTADE DE MATEMÁTICAS

Trabajo Fin de Grado

Ecuaciones Ginzburg-Landau

Miguel Pardo Bello

Curso 2018-2019

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

GRADO DE MATEMÁTICAS

Trabajo Fin de Grado

Ecuaciones Ginzburg-Landau

Miguel Pardo Bello

Julio 2019

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

Trabajo propuesto

Área del conocimiento: Análisis Matemática
Título: Ecuaciones Ginzburg-Landau
Director/a: María Victoria Otero Espinar y Manuel Vázquez Ramallo
Breve descripción del contenido
<p>Las ecuaciones diferenciales de Ginzburg-Landau ó GL (dadas por $(a - a_0)f + b f ^2f - f'' = 0$, siendo f una función compleja, y varias generalizaciones) fueron propuestas en 1950 por investigadores galardonados con premios Nobel en 1962 y 2003. A pesar de su aparente simplicidad, destacan por su particularmente amplio rango de aplicaciones prácticas, consecuente con la generalidad de su justificación: corresponden a una expansión en serie de Taylor de la energía de un sistema experimentando un cambio genérico desde un estado no ordenado (dado por un valor nulo del “parámetro de orden” f, que se da para $a > a_0$) a otro ordenado (f no nulo, para $a < a_0$). Las ecuaciones GL se utilizan, por ejemplo, en temáticas tan variadas como física de materiales (superconductores, líquidos complejos, etc.), astrofísica, economía, dinámica poblacional, y todo tipo de sistemas con transiciones orden-desorden.</p> <p>Los contenidos concretos de este TFG serán los siguientes:</p> <ul style="list-style-type: none"> I) Una introducción básica a la formulación de las ecuaciones GL, y una numeración de sus principales aplicaciones. II) La obtención y discusión de algunas de sus soluciones analíticas más simples, para casos de dominios de integración y condiciones de contorno que permitan encontrar dichas soluciones. III) El cómputo de soluciones numéricas de las ecuaciones GL para algunos casos en que los dominios de integración y condiciones de contorno no hacen práctica a la vía analítica de solución. Esta temática es hoy en día de gran interés aplicado (siendo por ejemplo uno de los objetivos principales de red de I+D NanoSC, con financiación específica de la Unión Europea). El alumno dispondrá de acceso al superordenador LBTS-epsilon (de unos 12000 núcleos y 31 Tflops, descrito en lbs.usc.es/epsilon) así como código en lenguajes python y/o openFOAM adaptables a la ecuación GL.

Índice general

Resumen	IV
Introducción y contribuciones del trabajo	v
1. Descripción de las ec. GL	1
1.1. Planteamiento de las ecuaciones	1
1.1.1. Ecuación GL en 2 dimensiones, real y no uniforme	2
1.2. Planteamiento desde el punto de vista de la física	3
1.2.1. Funcional de Landau sin variaciones espaciales	6
1.2.2. Variaciones espaciales en medios uniformes: Funcional y ecuación GL	10
1.3. Ecuaciones GL: Su introducción en la economía	14
2. Soluciones a casos sencillos y discusión	17
2.1. Ecuación GL $\phi \in \mathbb{R}$ en un medio 1D-uniforme en el caso linealizado $T > T_c$	17
2.2. Longitud de correlación ξ	19
2.3. Caso 1D-uniforme $\phi \in \mathbb{R}$ en el caso linealizado $T < T_c$	19
3. Resolución numérica para GL en 2D	21
3.0.1. Discretización y expresión matricial de la ecuación GL	21
3.0.2. Expresión del método de Newton para la ecuación GL discretizada matricial	29
4. Simulaciones	35
4.1. Breve descripción del computador paralelo	35
4.2. Parámetros utilizados	36
4.3. Resultados variando la globalización	38
4.3.1. Ejemplos de gráficas para las simulaciones obtenidas	38
4.3.2. Comparación entre distintas simulaciones y discusión	42
4.4. Resultados para los efectos de una política liberal	43
4.4.1. Ejemplos de gráficas para las simulaciones obtenidas	43
4.4.2. Comparación entre distintas simulaciones y discusión	45
4.4.3. Conclusión de la simulación	45
Bibliografía	47

Resumen

En el presente trabajo damos una descripción introductoria de las ecuaciones de Ginzburg-Landau y sus principales aplicaciones, tanto en física como en economía. Se comenta las posibles aplicaciones en distintos medios (uniforme y no uniforme) y distintas dimensiones (1D, 2D, caso general). Posteriormente se discretizan las ecuaciones GL no uniformes en 2-Dimensiones y se da una expresión matricial a dicha ecuación (algo novedoso hasta el momento), junto con un ejemplo de 4x4 para tener una mejor visualización. Por último, realizamos una simulación para modelizar la marcha económica en una región de 900 individuos, considerando distintos grados de variación de sus riquezas (políticas sociales versus liberales) y distintos rangos de intercambios comerciales (grado de globalización del mercado) y comentamos cuáles de las variaciones producen mejores resultados.

Abstract

In this project, we are going to describe the Ginzburg-Landau equations and their main applications, both in physics and economics. The possible applications in different media (uniform and non-uniform) and different dimensions (1D, 2D, general case) are discussed. Subsequently, the non-uniform GL equations are discretized in 2-Dimensions and a matrix expression is given to this equation (something new until now), together with a 4x4 example to have a better visualization. Finally, we are going to carry out a simulation to model the economic march in a region of 900 individuals, considering different degrees of variation of their wealth (social versus liberal policies) and different ranges of commercial exchanges (degree of market globalization) and we will also explain which variations produce better results.

Introducción y contribuciones del trabajo

Las ecuaciones diferenciales de Ginzburg-Landau ó GL fueron propuestas en 1950 por investigadores galardonados con premios Nobel (1962). A pesar de su aparente simplicidad, destacan por su particularmente amplio rango de aplicaciones prácticas, consecuente con la generalidad de su justificación: corresponden a una expansión en serie de Taylor de la energía de un sistema experimentando un cambio genérico desde un estado no ordenado (dado por un valor nulo del “parámetro de orden” ϕ , que se dá para $a > a_0$) a otro ordenado (ϕ no nulo, para $a < a_0$). Las ecuaciones GL se utilizan, por ejemplo, en temáticas tan variadas como física de materiales (superconductores, líquidos complejos, etc.), astrofísica, economía, dinámica poblacional, y todo tipo de sistemas con transiciones orden-desorden.

El objetivo de este trabajo es, por un lado hacer una descripción introductoria de estas ecuaciones de GL y de sus principales aplicaciones (capítulos 1 y 2, en donde se utilizan algunos ejemplos en física y en economía), y por otro lado (capítulos 3 y 4), presentar aportaciones originales conducentes a obtener estimaciones numéricas de las soluciones de estas ecuaciones en el caso no uniforme (es decir, que exista una dependencia espacial del término lineal) de interés aplicado pero de solución analítica cerrada no conocida.

Tal y como acabamos de comentar, este trabajo se divide en 4 capítulos.

En el primer capítulo introducimos el planteamiento formal de las ecuaciones GL en diferentes dimensiones (1D,2D, caso general) así como también definimos el caso real y el caso complejo. Adicionalmente nos centraremos en el caso más estudiado en este capítulo, el caso de la ecuación real no uniforme de dimensión 2. Seguidamente, haremos una breve descripción del planteamiento de las ecuaciones desde el punto de vista de la física y la aplicación que tiene dicha función a la economía. Veremos en capítulos posteriores una simulación aplicada a la economía en una situación cercana a una crisis económica.

En el segundo capítulo, introduciremos soluciones analíticas a un caso sencillo. Veremos las soluciones de la ecuación GL en un medio 1D- uniforme, en el caso linealizado $T > T_c$, definiremos el concepto de longitud de correlación, veremos las soluciones para el caso 1D-uniforme en el caso linealizado $T < T_c$.

Ya en el tercer capítulo, comenzaremos con la discretización y la expresión matricial de la ecuación GL. Será una tarea novedosa (hasta donde sabemos) que haremos apta para implementar informáticamente. Por tanto, comenzaremos considerando un espacio mallado, en el que definiremos unas condiciones de contorno y mostraremos explícitamente

la expresión de la ecuación GL en cada nodo discretizado. También comentaremos el método de Newton aplicado para resolver el sistema, así como un caso ilustrativo de una matriz de 4×4 en la que mostramos el resultado de la ecuación GL en forma matricial.

Por último, en el capítulo 4 es el capítulo en el que se hacen las simulaciones en la supercomputadora, la cuál se comentará brevemente al inicio del capítulo, y su posterior análisis de los resultados. Se comentarán los parámetros utilizados, daremos una breve explicación de las figuras obtenidas y posteriormente explicaremos su significado aplicadas a la economía cuándo ésta se sitúa cerca de una crisis. Tomaremos un mapa base para luego ir modificando los parámetros y ver los resultados obtenidos y sacar unas conclusiones.

Capítulo 1

Descripción de las ecuaciones Ginzburg-Landau (GL)

1.1. Planteamiento de las ecuaciones

En esta sección vamos a describir el problema matemático que vamos a considerar, dejando para las siguientes secciones (1.2 y 1.3) su planteamiento en términos aplicados, en los ámbitos de la física y de la economía.

Ecuación GL en 1 dimensión, caso real y uniforme

Empezamos por el caso más sencillo de esta ecuación, el cual se define como:

Definición 1.1. Sea $\psi \in \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Se dice que verifica la ecuación de Ginzburg-Landau de parámetros α, β, τ con $\alpha \in \mathbb{R}, \beta \geq 0$ y $\tau \geq 0$ y con condiciones de contorno periódicas en el intervalo $[a, b]$ si cumple

$$\begin{cases} \alpha\psi(x) + \beta\psi^3(x) - \tau\psi''(x) = 0 \quad \forall x \in [a, b] \\ \psi(x + L) = \psi(x) \quad \forall x \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (1.1)$$

siendo $L = b - a$.

Ecuación GL en D dimensiones, real y uniforme

Vamos a dar una definición para el caso D-dimensional:

Definición 1.2. Sea $\psi \in \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$. Se dice que verifica la ecuación de Ginzburg-Landau de parámetros α, β, τ con $\alpha \in \mathbb{R}, \beta \geq 0$ y $\tau \geq 0$ y con condiciones de contorno periódicas en el D-intervalo $[a, b]^D$ si cumple

$$\begin{cases} \alpha\psi(x) + \beta\psi^3(x) - \tau\nabla^2\psi(x) = 0 \quad \forall x \in [a, b]^D \\ \psi(x + L) = \psi(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^D \end{cases} \quad (1.2)$$

donde $\nabla^2\psi(x) = \nabla\nabla\psi(x) \equiv \sum_{i=1}^D \frac{\partial^2\psi}{\partial x_i^2}$, $L = b - a$ y $x = (x_1, x_2, \dots, x_D)$.

Ecuación GL en D dimensiones, compleja y uniforme

Vamos ver ahora la definición para el caso complejo. Si bien en este trabajo nos centraremos en el caso real, $\psi \in \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$, en los estudios de física es frecuente estudiar el caso complejo en el que $\psi \in \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$. Este caso se plantearía como sigue:

Definición 1.3. Sea $\psi : [a, b] \in \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$. Se dice que verifica la ecuación de Ginzbug-Landau de parámetros α, β, τ con $\alpha \in \mathbb{R}, \beta \geq 0$ y $\tau \geq 0$ y con condiciones de contorno periódicas si cumple

$$\begin{cases} \alpha\psi(x) + \beta|\psi(x)|^2\psi(x) - \tau\nabla^2\psi(x) = 0 \quad \forall x \in [a, b] \\ \psi(x + L) = \psi(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^D \end{cases} \quad (1.3)$$

donde $\nabla^2\psi(x) = \nabla\nabla\psi(x) \equiv \sum_{i=1}^D \frac{\partial^2\psi}{\partial x_i^2}$, $L = b - a$ y $x = (x_1, x_2, \dots, x_D)$.

Ecuación GL D dimensiones, real y no uniforme

Veremos el caso en que las ecuaciones son reales no uniformes.

Definición 1.4. Sea $\psi \in \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$. Se dice que verifica la ecuación de Ginzbug-Landau de parámetros α, β, τ , con $\alpha : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$ continua y derivable, $\beta \geq 0$ y $\tau \geq 0$ y con condiciones de contorno periódicas en el D-intervalo $[a, b]^D$ si cumple

$$\begin{cases} \alpha(x)\psi(x) + \beta\psi^3(x) - \tau\nabla^2\psi(x) = 0 \quad \forall x \in [a, b]^D \\ \psi(x + L) = \psi(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^D \end{cases} \quad (1.4)$$

donde $\nabla^2\psi(x) = \nabla\nabla\psi(x) \equiv \sum_{i=1}^D \frac{\partial^2\psi}{\partial x_i^2}$, $L = b - a$ y $x = (x_1, x_2, \dots, x_D)$.

1.1.1. Ecuación GL en 2 dimensiones, real y no uniforme

Este es el caso al que prestaremos más atención y por tanto lo escribimos explícitamente aquí (aún siendo un caso particular obvio del caso anterior).

Definición 1.5. Sea $\psi \in \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. Se dice que verifica la ecuación de Ginzbug-Landau de parámetros α, β, τ , con $\alpha : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ continua y derivable, $\beta \geq 0$ y $\tau \geq 0$ y con condiciones de contorno periódicas en el intervalo $[a, b]^2$ si cumple

$$\begin{cases} \alpha(x, y)\psi(x, y) + \beta\psi^3(x, y) - \tau\nabla^2\psi(x, y) = 0 \quad \forall (x, y) \in [a, b]^2 \\ \psi((x, y) + L) = \psi(x, y) \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^2 \end{cases} \quad (1.5)$$

donde $\nabla^2\psi(x, y) = \nabla\nabla\psi(x, y) \equiv \frac{\partial^2\psi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x, y)}{\partial y^2}$ y $L = b - a$.

Caso lineal

Se dice del caso en que $\beta=0$. En ese caso, si ψ_1 y ψ_2 son GL, también lo será $a_1\psi_1 + a_2\psi_2$ (Las ecuaciones GL lineal forman un espacio vectorial). Veámoslo:

$$\begin{array}{rclcl}
 \alpha\psi_1 & + & \beta\psi_1^3 & - & \tau\nabla^2\psi_1 = & 0 \\
 + & & & & & \\
 \alpha\psi_2 & + & \beta\psi_2^3 & - & \tau\nabla^2\psi_2 = & 0 \\
 \hline
 \alpha(\psi_1 + \psi_2) & + & \beta(\psi_1^3 + \psi_2^3) & - & \tau\nabla^2(\psi_1 + \psi_2) = & 0
 \end{array} \tag{1.6}$$

de la misma forma:

$$\begin{array}{rcl}
 \psi_1(x+L) & = & \psi_1(x) \\
 + & & \\
 \psi_2(x+L) & = & \psi_2(x) \\
 \hline
 (\psi_1 + \psi_2)(x+L) & = & (\psi_1 + \psi_2)(x)
 \end{array} \tag{1.7}$$

y por tanto vemos que sigue siendo GL.

Existencia y unicidad de solución

La demostración de la existencia de soluciones únicas para la ecuación de Ginzburg-Landau es aún un problema abierto, con artículos en fechas tan recientes como 2004 que tratan todavía no con el caso general sino solo con casos específicos de la ecuación (el caso que estudiaremos será con coeficiente lineal dependiente de la posición, no uniforme como en ese artículo) y de las condiciones de contorno. Se puede ver en el artículo [8] comentado en la bibliografía.

Más adelante veremos la solución para un caso ilustrativo en 1D. Para casos más generales, aunque existen algunos estudios para el caso GL uniforme, son inviables para el no uniforme en el caso general, y de ahí que haya que recurrir a métodos numéricos para reconvertirlas en ecuaciones algebraicas, que producen soluciones únicas plausibles.

1.2. Ecuaciones GL: Planteamiento desde el punto de vista de la física

La teoría de Landau de las transiciones de fase es uno de los instrumentos más potentes de la física contemporánea, con numerosas aplicaciones no sólo en la explicación de las propiedades en las proximidades de los cambios de estado de los materiales (el ámbito para

el que el formalismo se introdujo originalmente), sino también para todo tipo de sistemas que puedan experimentar una transición entre dos (o más) estados de distinta ordenación o simetría (o coherencia, etc).

Figura 1

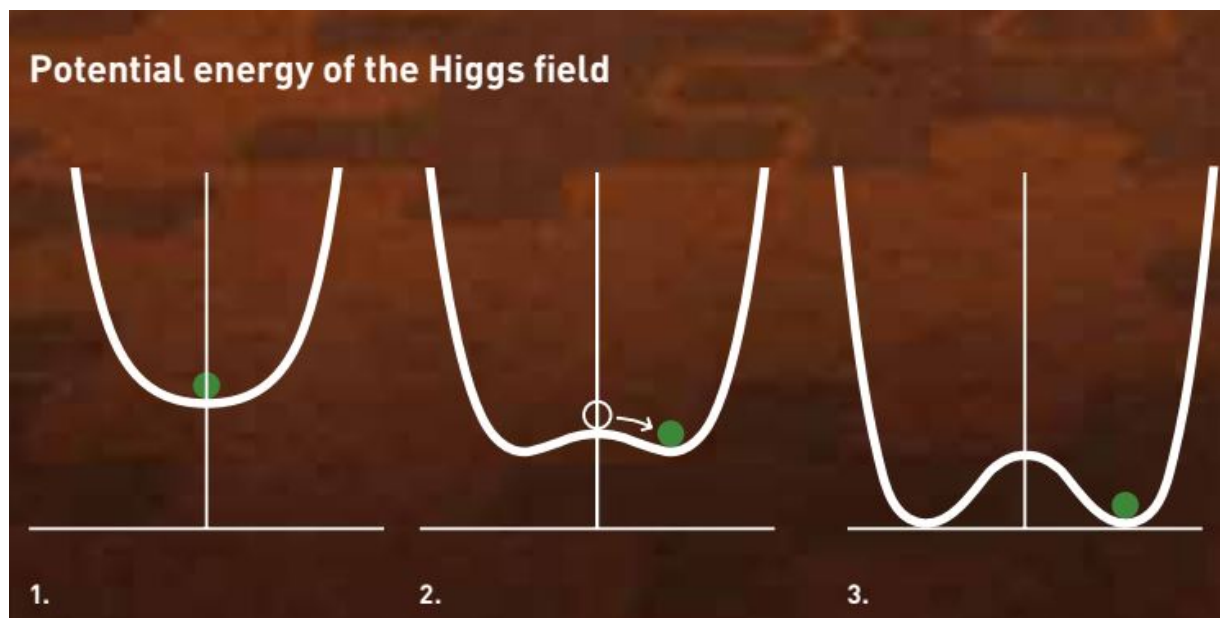


Figura 1: Figura del póster explicativo publicado por la fundación Nobel sobre el bosón de Higgs (Premio 2013). El mecanismo de Higgs se basa en el concepto de ruptura espontánea de la simetría en la ecuación GL (Nótese la similitud con nuestra Figura 4). Nuestro universo probablemente nació simétrico (1), con un valor cero para el campo de Higgs en el estado más bajo de energía, el vacío. Pero menos de una billonésima de segundo después del Big Bang, la simetría se rompió espontáneamente como la energía más baja alejada de la simetría del punto-cero(2). Desde entonces, el valor del campo de Higgs en estado vacío ha sido distinto de cero (3). Disponible en la web de la academia sueca de ciencias Kungl.Vetenskapsakademien.

Landau es unanimamente reconocido como uno de los físicos más influyentes y elegantes de la segunda mitad del siglo XX. Se le considera el padre de la muy potente (aún hoy, bajo otro nombre) escuela de física soviética, junto con su coetáneo (algo mayor) P. Kapitsa, quien lo salvó famosamente de ser arrestado por orden directa de Stalin en un campo de reeducación.

A Landau se le reconoce inmensa maestría en formular modelos elegantes, y aparentemente sencillos (y de gran capacidad predictiva), pero que ninguno de sus coetáneos investigando los mismos temas se les ocurrió proponer. La teoría de Landau de las transi-

ciones de fase es un ejemplo paradigmático de ello. Landau formula una primera versión en 1937, en el contexto del estudio de las transiciones de fase continuas o de segunda especie. Poco después, en colaboración con V. Ginzburg establece una mejora del modelo, en la que se generaliza el mismo al (aún hoy) importante caso de los materiales SC (superconductores) y SF (superfluidos) mediante la introducción de correlaciones entre distintos puntos en el espacio. Por ello, hoy el modelo se conoce como de Landau si no considera la dependencia espacial, y de Landau-Ginzburg (LG), de Ginzburg-Landau (GL, lo más habitual) o de Landau (y a veces ϕ^4), en su versión completa.

Para introducir su propuesta de ecuación, GL emplean el formalismo conocido en el campo de la física de “energía libre”. Éste se caracteriza por proponer no una ecuación dinámica directamente ¹, sino una función objetivo cuya optimización define el comportamiento del sistema. En particular, introducen una “energía libre” F (o potencial termodinámico) como es habitual en distintos tratamientos de la física estadística. Esta energía libre o función F , debe ser minimizada para obtener el estado real del sistema físico que se modeliza. F es una función del microestado ψ del sistema, siendo este último el conjunto de estados de las entidades que componen el sistema.

GL buscaba un modelo válido para las situaciones próximas a cambios de estado (o transiciones de fase), en los que pequeñas variaciones de los parámetros involucrados (por ejemplo, la temperatura, la presión, el campo magnético, etc) producen un gran cambio del estado, es decir, conducen a valores de ψ que marcan grandes diferencias cualitativas (material normal frente a superconductor o superfluido; material diamagnético frente al ferromagnético; líquido complejo uniforme frente al nanoestructurado; etc). Dichos grandes cambios son difíciles de modelizar por otros formalismos, que a menudo suponen cambios no radicales de ψ , mientras que las teorías GL se formulan precisamente para los fenómenos y cambios críticos, en términos de transición orden-desorden de ψ .

La idea primordial de Landau consistió en caracterizar el microestado del sistema en función de su “orden”, visualizando así las transiciones de fase como cambios de un estado “desordenado” a otro “ordenado”. Introduce pues el concepto de “parámetro de orden”, que identifica con ψ . Propone entonces una expresión general de F en función de ψ inspirada, como veremos en este trabajo, en las expansiones en serie de potencias (de $F(\psi)$, en torno a $\psi = 0$), y procede a preguntarse qué valor de ψ hace mínimo F (el conocido como valor de equilibrio ψ_{eq} , que es el que el sistema físico realmente adoptará). La gran generalidad de dichos argumentos es precisamente la causa de la aplicabilidad de la teoría GL a un rango tan amplio de casos de distintas transiciones en la naturaleza. Para cada caso, varía el significado concreto del parámetro de orden ψ en términos de los parámetros definitorios del sistema físico concreto. Por ejemplo, en el caso de la transición Ising ferromagnética, ψ viene dado por la orientación global de los momentos magnéticos, $\psi = \frac{(n_+ - n_-)}{(n_+ + n_-)}$ siendo n_+ y n_- el número de momentos magnéticos orientados positiva o negativamente. En el caso de los líquidos complejos (anfifílicos, poliméricos, iónicos, cristales líquidos, y un largo etcétera) es el imbalance de iones positivos frente a iones negativos. En el caso de los “condensados

¹como podría ser la famosa ecuación de Newton para fuerzas conservativas $\vec{f}(\vec{r}) = \frac{m d^2 \vec{r}}{dt^2}$ con $t \in \mathbb{R}$, $\vec{r}(t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$, $f(\vec{r}) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, cuya integración en t resulta en la dinámica $\vec{r}(t)$.

cuánticos” de Bose-Einstein y superfluidos,² es el número de partículas capaces de tal condensación (bosones, o partículas de spin entero) que han adoptado el estado especial (coherente y colectivo) que define dichos estados condensados.

El caso de los materiales superconductores, hoy en día es cada vez más importante por sus aplicaciones tecnológicas. Es precisamente el caso para el que GL originalmente introdujo la dependencia espacial de ψ ($\psi(\vec{r})$ siendo $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$ la posición), que añade a la teoría su complejidad e interés desde el punto de vista de las matemáticas.

En el caso superconductor, ψ es la llamada “función de onda superconductora”, es decir, la función compleja cuyo módulo proporciona la amplitud de densidad de “superportadores”, o portadores eléctricos (electrones, en el caso más simple) que han adoptado el estado superconductor en el material.

$$\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$$

$$\int_V d\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 = \text{número de superportadores en el volumen } V. \quad (1.8)$$

La naturaleza compleja de ψ fue sugerida en analogía a lo que sucede en la mayoría de las teorías cuánticas (ec. de Schroëdinger, etc) y ya anteriormente a GL los hermanos London desarrollaron ecuaciones, más primitivas, que reproducían una parte de la fenomenología superconductora en base a una “función de ondas” compleja. Es reseñable que GL introducen esta ψ antes de que en 1957 los occidentales Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS)³ desarrollasen una teoría microscópica de la superconductividad (en términos de las ecuaciones individuales de cada electrón), la cuál confirma la validez de la ecuación GL con un ψ complejo. Con todo, dado que $|\psi|^2 = (\psi Re)^2 + (\psi Im)^2$, la ecuación compleja puede verse como dos ecuaciones GL, una para cada componente en la mayor parte de los casos de interés.

En las siguientes secciones vamos a desarrollar (someramente) los argumentos físicos conducentes a una ecuación para ψ (ecuación Ginzbug-Landau que veremos más adelante, en la ecuación 1.24).

1.2.1. Funcional de Landau sin variaciones espaciales

Buscamos un modelo que reproduzca la siguiente fenomenología de cambio de estado o transición de fase, de un sistema dado: Cuando cierto parámetro (“parámetro crítico”), $T \in \mathbb{R}$, del sistema excede un valor T_c (“valor crítico”), el sistema se halla en la fase que llamaremos “desordenada” o “fase $T > T_c$ ”, y que se corresponde a un valor nulo $\phi = 0$ del “parámetro de orden” $\phi \in \mathbb{R}$. Cuando $T < T_c$ el sistema entra en la fase “ordenada” ó “fase $T < T_c$ ”, en la que ϕ aumenta su valor absoluto monotonamente según T disminuye. La evolución $\phi(T)$ es en todo momento continua, como ilustraremos cualitativamente en

²Estos son estados exóticos de la materia quizás no muy conocidos popularmente pero cuyo estudio ha merecido el premio Nobel de Física en múltiples ocasiones (en 1913, 1972, 1973, 1987, 2003, 2008, 2016).

³BCS recibieron el Nobel 1972 por su teoría sobre la superconductividad. El artículo en que sugirieron dicha teoría (teoría “BCS”) fue durante décadas el más citado de la física. Bardeen es la única persona con dos Nobel de Física (efecto transistor en 1956).

la siguiente figura. En particular, $\phi(T_c) = 0$. Planteamos que dicha fenomenología sea la solución de un problema de optimización, buscando para la construcción del modelo una función objetivo F siendo F tal que $F(\phi, T) \in \mathbb{R}$ que deberemos minimizar en función de ϕ para cada valor dado de T . Asimismo, un aspecto muy importante de nuestro planteamiento general será buscar para F una opción que esté entre las más sencillas posibles capaces de reproducir la fenomenología de interés.

Figura 2

Comportamiento cualitativo que buscamos reproducir en la modelización del cambio de estado. El subíndice eq indica la solución al problema de minimización de $F : F(\phi, T) = F_{eq}(T) = \min$ si $\phi = \phi_{eq}$.

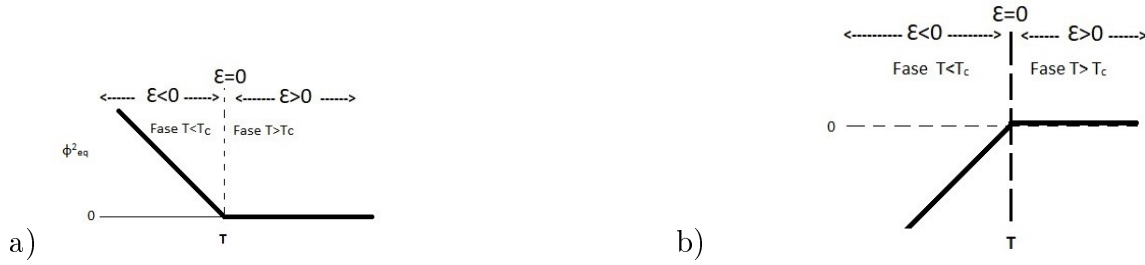


Figura a): En esta figura representamos el valor de ϕ_{eq}^2 en función del parámetro T (o equivalentemente ϵ .)

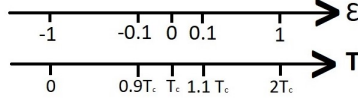
Figura b): En esta figura representamos el valor de F_{eq} en función del parámetro T (o equivalentemente ϵ .)

Una forma de visualizar la minimización del funcional $F(\phi, T)$ es graficar $F(\phi)$ para $T > T_c$ y $T < T_c$. Esto conduce a la gráfica de la Figura 4 (durante décadas, la gráfica se ha convertido en el ámbito de la física en célebre y conocida como “gráfica de bebé”; actualmente dicho nombre coexiste en la literatura con el más “políticamente correcto” de “gráfica de sombrero mejicano”).

Esta figura muestra la gráfica de las soluciones dadas por las ecuaciones 1.18 y 1.19, que veremos en la siguiente Figura, para ϕ_{eq} y F_{eq} . Podrá observarse que se reproducen los resultados cualitativos buscados.

Figura 3

Comparación entre los ejes T y $\epsilon = (T - T_c)/T_c$:



En adelante, el subíndice $_{eq}$ indicará la solución del problema de minimización de F respecto de ϕ (lo que en física a menudo se conoce como solución de equilibrio termodinámico, de ahí la notación). Así, $\phi_{eq}(T)$ minimiza $F(\phi, T)$ y el valor minimizado de F será $F_{eq}(T)$.

También emplearemos en ocasiones los superíndices $+$ y $-$ como abreviamos para indicar $T > T_c$ ó $T < T_c$ respectivamente. Así por ejemplo afirmamos que $\phi_{eq}^+ = 0$ y $F_{eq}^+ = 0$.

Dado que (ver Figura 2) es razonable buscar en la modelización que cerca de T_c los valores relevantes de $\phi_{eq}(T)$ y $F_{eq}(T)$ sean continuos y pequeños, procederemos buscando un desarrollo en serie de potencias de F sobre ϕ en torno a $\phi = 0$:

$$F(\phi, T) = \mu_0(T) + \mu_1(T)\phi + \mu_2(T)\phi^2 + \mu_3(T)\phi^3 + \mu_4(T)\phi^4 + \dots = \sum_i \mu_i(T)\phi^i \quad (1.9)$$

Asimismo, cerca de la transición puede tomarse como pequeña la cantidad ε definida como (“parámetro crítico reducido”):

$$\varepsilon \equiv (T - T_c)/T_c \quad (1.10)$$

La comparación entre los valores de T y ε puede verse en la figura anterior. Nótese que $\varepsilon \leq 0$ corresponde a $T \leq T_c$.

Al ser ε pequeño, buscamos también desarrollos en serie de los coeficientes μ_i en potencias de ε :

$$\begin{aligned} \mu_0(T) &= \mu_{00} + \mu_{01}\varepsilon + \mu_{02}\varepsilon^2 + \dots \\ \mu_1(T) &= \mu_{10} + \mu_{11}\varepsilon + \mu_{12}\varepsilon^2 + \dots \\ &\vdots \\ \mu_i(T) &= \sum_j \mu_{ij}\varepsilon^j \end{aligned} \quad (1.11)$$

Dado que $F, \phi, \varepsilon \in \mathbb{R}$, será $\mu_i, \mu_{ij} \in \mathbb{R}$. Laundau propuso, por inspección, que la forma más sencilla de tales desarrollos en potencias de ϕ y ε que reproduce la fenomenología esperada para una transición de fase es la siguiente opción:

$$F = a_0\varepsilon\phi^2 + \frac{b}{2}\phi^4 \quad (1.12)$$

Donde a_0 y b son constantes reales mayores que cero, para las cuales hemos introducido en la ecuación 1.12 las notaciones que se han hecho habituales en la física.

En este texto vamos a mostrar en primer lugar que, en efecto, la fórmula 1.12 reproduce la fenomenología de una transición de fase.

Calculemos los ϕ_{eq} y F_{eq} a que la ecuación 1.12 conduce. Para ello, calculamos los extremos de $F(\phi)$ mediante el análisis de $\frac{\partial F}{\partial \phi}$ y $\frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2}$:

$$\frac{\partial F}{\partial \phi} = 2a_0\varepsilon\phi + 2b\phi^3 = 2\phi(a_0\varepsilon + b\phi^2) \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} = 2a_0\varepsilon + 6b\phi^2 \quad (1.14)$$

La condición $\frac{\partial F}{\partial \phi}|_{\phi=\phi_{eq}} = 0$ lleva a tres soluciones posibles:

$$\phi_{eq} = 0$$

$$\phi_{eq} = +\sqrt{\frac{-a_0\varepsilon}{b}}$$

ó

$$\phi_{eq} = -\sqrt{\frac{-a_0\varepsilon}{b}}$$

Respecto al caso $\phi_{eq} = 0$, vemos a través del signo de $\frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2}|_{\phi=0}$ si efectivamente se corresponde a un mínimo, o a un máximo:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2}|_{\phi=0} = 2a_0\varepsilon \leq 0 \text{ si } \varepsilon \leq 0 \text{ (} T \leq T_c \text{)} \quad (1.15)$$

Vemos que solo es un mínimo si $\varepsilon > 0$ ($T > T_c$). Para $\varepsilon < 0$, es un máximo.

Análogamente, veamos $\frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2}$ para las otras dos opciones para ϕ_{eq} , caracterizadas ambas por $\phi_{eq}^2 = \frac{-a_0\varepsilon}{b}$:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2}|_{\phi^2=\frac{-a_0\varepsilon}{b}} = 2a_0\varepsilon - \frac{6ba_0\varepsilon}{b} = -4a_0\varepsilon \leq 0 \text{ si } \varepsilon \leq 0 \text{ (} T \leq T_c \text{)} \quad (1.16)$$

Vemos que, al contrario que $\phi_{eq} = 0$, corresponden a mínimos para $\varepsilon < 0$ ($T < T_c$) y máximos para $\varepsilon > 0$ ($T > T_c$).

No hemos estudiado arriba el caso $\varepsilon = 0$ ($T = T_c$). En este caso es

$$F = \frac{b}{2}\phi^4 \text{ (} \varepsilon = 0, T = T_c \text{)} \quad (1.17)$$

y dado que $b < 0$ el único mínimo es en $\phi_{eq} = 0$.

El hecho de que $b > 0$ también garantiza que $F \rightarrow \infty$ si $\phi \rightarrow \pm\infty$, con lo que al ser $F(\phi)$ continua nos lleva a que los anteriores cálculos de mínimos locales ϕ_{eq} son también mínimos globales.

En resumidas cuentas, obtenemos para ϕ_{eq} la siguiente solución:

$$\phi_{eq} = \begin{cases} \phi_{eq}^+ = 0 & \text{si } \varepsilon > 0 & (T > T_c) \\ \phi_{eq}^- = \pm \sqrt{\frac{-a_0 \varepsilon}{b}} & \text{si } \varepsilon < 0 & (T < T_c) \end{cases} \quad (1.18)$$

Reproduciendo así el comportamiento buscado, descrito en la Figura 2, para ϕ_{eq} . También se reproduce el comportamiento buscado para $F_{eq}(T)$, dado en la misma figura, ya que por sustitución directa del ϕ_{eq} calculado en la expresión GL para F resulta:

$$F(\phi = \phi_{eq}, T) = \begin{cases} F_{eq}^+ = 0 & \text{si } \varepsilon > 0 & (T > T_c) \\ F_{eq}^- = \frac{-(a_0 \varepsilon)^2}{2b} & \text{si } \varepsilon < 0 & (T < T_c) \end{cases} \quad (1.19)$$

Figura 4

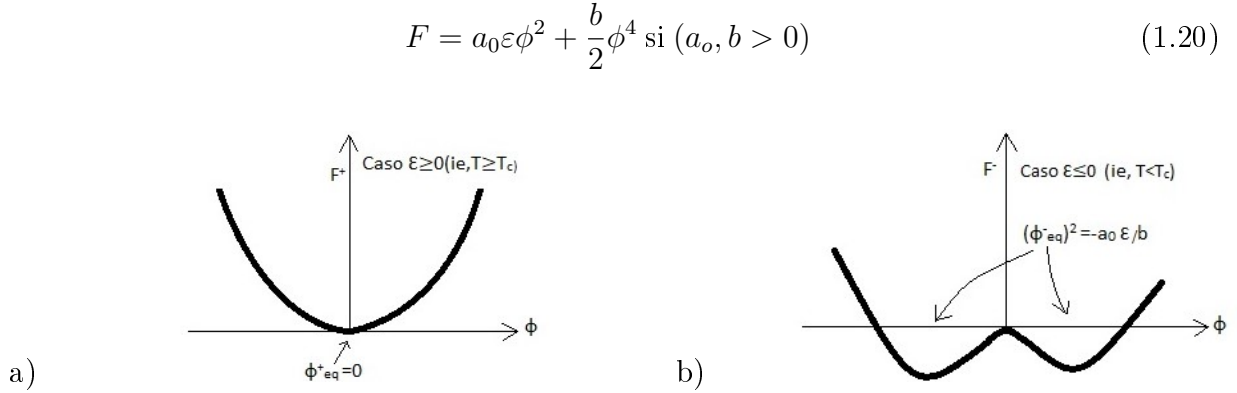


Figura 4: En esta figura podemos observar el valor de equilibrio de ϕ_{eq} para distintos valores del parámetro ε .

1.2.2. Variaciones espaciales en medios uniformes: Funcional y ecuación GL

Introducción de variaciones espaciales de ϕ : Funcional GL

Si admitimos ahora una variación espacial para ϕ , esta deja de ser una variable real, y pasa a ser una función $\phi(\vec{r})$ definida en $\vec{r} \in \mathbb{R}$. Si bien D es en la mayoría de los casos reales D=3 (materiales tridimensionales ó 3D), son también relevantes otras dimensionalidades como D=1 ó D=2 (materiales de dimensionalidad reducida como los superconductores laminares o el grafeno; problemas definidos sobre un mapa geográfico 2D como en los modelos económicos, etc.) La inclusión de la dependencia $\phi(\vec{r})$ en el funcional F se hace siguiendo la misma filosofía de búsqueda de desarrollos de potencia sencillos que reproduzcan la fenomenología cualitativamente esperable. En este caso, ello implica dos pasos:

- 1) En primer lugar, se añade a la expansión de Landau un término proporcional a pequeñas variaciones del gradiente de ϕ con r . El añadido más simple que produce una fenomenología aceptable sería proporcional a $(\nabla\phi)^2$:

$$f(r) = a_0 \varepsilon \phi^2(\vec{r}) + \frac{b}{2} \phi^4(\vec{r}) + a_0 \xi^2(0) (\nabla\phi(\vec{r}))^2 \quad (1.21)$$

Donde ya hemos introducido para el coeficiente de proporcionalidad la notación usual $a_0 \xi^2(0)$. La razón de dicha notación quedará clara más adelante. También hemos introducido el hecho de que dicho coeficiente sea positivo (así pues, $a_0, b > 0$, $a_0 \xi^2(0) > 0$ y tomamos también $\xi(0) > 0$). En el caso de optar por un coeficiente negativo la minimización de la cantidad 1.21 sería imposible pues dicha cantidad se haría $-\infty$ con $\nabla\phi \rightarrow \pm\infty$, es decir, la nueva consideración de $\phi(\vec{r})$ altamente oscilantes nos conduciría a un decrecimiento sin límites de 1.21. Análogamente, quedarnos en un término en primer orden en $\nabla\phi$ en 1.21 impediría su minimización. Así pues la forma 1.21 fue propuesta por GL como, de nuevo, la expresión que parece ser la más sencilla compatible con que reproduzca una cierta fenomenología vía su minimización.

- 2) El segundo paso es percatarse de que la cantidad 1.21 es todavía dependiente de \vec{r} . Para reducir esa cantidad a un único número falta integrarla, $F = \int d^D \vec{r} f(\vec{r})$ ó:

$$F = \int d^D \vec{r} \left\{ a_0 \varepsilon \phi^2(r) + \frac{b}{2} \phi^4(r) + a_0 \xi^2(0) (\nabla\phi(\vec{r}))^2 \right\} \quad (1.22)$$

A 1.22 se la conoce como “funcional de energía libre de GL”, mientras que 1.21 sería la “densidad de energía libre” correspondiente.

La minimización de 1.22 respecto de $\nabla\phi(\vec{r})$ es trivial si no se imponen más condiciones: Dado que el término $a_0 \xi^2(0) (\nabla\phi(r))^2$ es ≥ 0 , la minimización se consigue con $\nabla\phi = 0$, es decir $\phi = \text{const}$ con \vec{r} . Dicho valor constante con \vec{r} no es más que el ϕ_{eq}^\pm calculado en la sección anterior.

Ahora bien, la minimización de 1.22 ya no es tan trivial si se imponen ligaduras para $\phi(\vec{r})$ adicionales. Así por ejemplo condiciones de contorno en un cierto conjunto de puntos $\vec{r} \in \Gamma$. Es, de hecho, habitual querer minimizar 1.22 restringiendo el conjunto al que pertenece \vec{r} a un dominio \mathbb{D} , subconjunto de \mathbb{R}^D , que en adelante tomaremos como conexo para evitar complicaciones no esenciales. En ese caso se imponen condiciones para $\phi(\vec{r})$ en la frontera, \mathbb{S} , del dominio (condiciones de contacto con otros materiales, por ejemplo). Otro caso habitual es imponer valores para $\phi(\vec{r})$ en puntos aislados discretos de \mathbb{D} (suposición de excitaciones puntuales) lo cual de hecho equivale a excluir de \mathbb{D} a dichos puntos.

Dado que 1.22 depende de la función $\phi(\vec{r})$, y no del número ϕ , su minimización debe hacerse por medio de las ecuaciones de Euler-Lagrange del cálculo de variaciones:

$$\frac{\partial f(\vec{r})}{\partial \phi} - \sum_{j=1}^D \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial (\nabla_j \phi)} = 0 \quad (1.23)$$

donde $\nabla_j \phi$ es la componente en la dirección j del gradiente de ϕ . La aplicación a 1.22 conduce, trivialmente, a:

$$a_0 \varepsilon \phi + b \phi^3 - a_0 \xi^2(0) \nabla^2 \phi = 0 \quad (1.24)$$

Donde obviamente $\nabla^2 \phi$ es $\nabla(\nabla \phi)$, es decir $\nabla^2 \phi = \sum_{j=1}^D \partial^2 \phi / \partial x_j^2$. La ecuación 1.24 es precisamente la célebre “**ecuación de Ginzburg-Landau**” ó “**ecuación de Landau-Ginzburg**” (ecuación GL en este texto). Evidentemente el caso $\phi = \text{const.}$ con \vec{r} estudiado en el apartado anterior se recupera en este caso simplemente eliminando el término $\nabla^2 \phi$.

La ecuación GL sería bastante trivial de no ser por la aparición del sumando en $b \phi^3$. Esta contribución convierte a la ecuación en no lineal. En el caso general de $b \neq 0$ y con dominios \mathbb{D} y condiciones de contorno sobre \mathbb{S} arbitrarios, la ecuación no es resoluble analíticamente. Ello obliga a su estudio computacional numérico.

Aún así, en algunos casos particulares la ecuación GL admite solución analítica, y dichos casos son muy útiles para entender algunos hechos básicos de la fenomenología de los sistemas descritos por la ecuación GL. Destaca entre esos hechos el significado del coeficiente $\xi(0)$ que acompaña al término del gradiente. El siguiente capítulo ilustrará dicha cuestión.

Introducción del caso $\phi \in \mathbb{C}$

Como ya se ha mencionado en la introducción, en algunos casos de la física es deseable considerar parámetros de orden ϕ que sean complejos, $\phi \in \mathbb{C}$, más que reales. Destacadamente, para materiales superconductores el ϕ apropiado es la función de onda mecano-cuántica colectiva de los portadores eléctricos condensados al estado superconductor. En particular, en un superconductor ϕ será la “amplitud de densidad” de superconductores en el material. Dicho de otro modo, el número de superconductores en un volumen confinado τ vendrá dado por

$$\int_{\vec{r} \in \tau} |\phi(\vec{r})|^2 d\vec{r} \quad (1.25)$$

El funcional GL se adapta al caso en que $\phi \in \mathbb{C}$ simplemente como

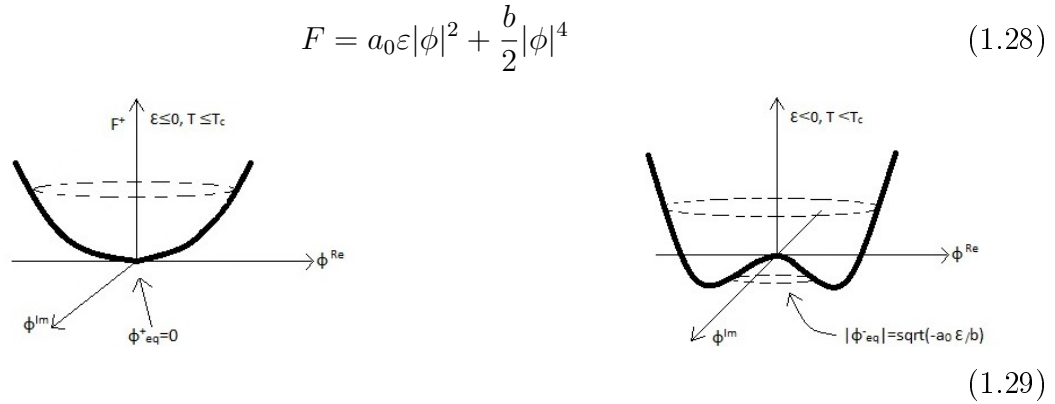
$$F = \int d^D \vec{r} \left\{ a_0 \varepsilon |\phi|^2 + \frac{b}{2} |\phi|^4 + a_0 \xi^2(0) |\nabla \phi|^2 \right\} \quad (1.26)$$

La mayor novedad a la fenomenología inducida por el carácter complejo de ϕ es la aparición de grados de libertad asociados a la fase (y no sólo al módulo) de ϕ . Esto es visible considerando la minimización del funcional. El caso más elemental vuelve a ser $|\nabla \phi| = 0$, correspondiente a no imponer ninguna ligadura extra a ϕ (condiciones de contorno, etc.). En ese caso se recupera la solución del caso ϕ uniforme y real (ya visto anteriormente), pero en esta ocasión substituyendo dicho ϕ por $|\phi|$. De modo que

$$|\nabla \phi| = 0 \Rightarrow \begin{cases} |\phi_{eq}^+| = 0 \\ |\phi_{eq}^-| = \sqrt{\frac{-a_0 \varepsilon}{b}} \end{cases} \quad (1.27)$$

La gran diferencia con respecto al caso real es que ahora la condición para ϕ_{eq}^- no determina solo dos soluciones, sino un continuo de ellas dado que solo el módulo queda determinado, y no la fase. La situación puede visualizarse mejor en la Figura 5, en que se grafica F para $|\nabla\phi| = 0$ respecto a $\phi = (\phi^{Re}, \phi^{Im}) \in \mathbb{C}$.

Figura 5



Esta situación implica que una vez que el sistema se encuentra en el estado ordenado ($\varepsilon < 0$, i.e., $T < T_c$), el sistema pueda evolucionar a lo largo del círculo $|\phi_{eq}^-|^2 = -a_0\varepsilon/b$ moviendo la fase de ϕ_{eq} sin coste energético alguno, y sin ninguna energía de activación. Este grado de libertad es el conocido como **Bosón de Goldstone** (más recientemente se viene popularizando el término **Bosón de Higgs**, por su relevancia reciente en los estudios de física de partículas de alta energía).

Haciendo el mismo tratamiento de multiplicadores de Lagranje, las ecuaciones GL, $\phi \in \mathbb{C}$ quedan

$$a_0\varepsilon\phi + b|\phi|^2\phi - a_0\xi^2(0)\nabla^2\phi = 0 \quad (1.30)$$

Ecuación de GL en medios no uniformes

Hemos considerado hasta ahora casos en que los parámetros básicos del sistema (o medio material al que se refiere la coordenada posición \vec{r}) son uniformes. Así por ejemplo el valor de T_c no depende de la posición \vec{r} . Éste es sin duda el caso que históricamente ha despertado más atención por ser el caso básico con el que pueden entenderse los materiales “sencillos” (los cuales suelen ser de complicación suficiente como para que su estudio haya ocupado años a la comunidad investigadora...)

Sin embargo, recientemente vienen cobrando cada vez más atención los casos en que el medio no es uniforme (por ejemplo, superconductores con un contenido no uniforme de impurezas lo cual lleva a una dependencia $T_c(\vec{r})$ no constante. Un ejemplo ilustrativo es la real europea COST-NanoSC de investigación de superconductores nanoestructurados, dedicada a la consecución y estudio de superconductores cuyas propiedades varían en la micro- y nano-escala. No conviene olvidar que debemos la electrónica de estado sólido (la posterior a las válvulas de vacío) a estudios similares en otros materiales (los semiconductores) dan

lugar a diodos, transistores, etc, precisamente al variar espacialmente en dichas escalas sus propiedades, como el nivel de dopado con impurezas). Los superconductores micro- y nano-estructurados son ya relevantes en las tecnologías de transporte de electricidad de gran potencia (ahorros de aprox. 30 % en la electricidad que precisan generarse para atender un mismo consumo; instalaciones ya funcionando como las Tres Amigas Superstation que sincroniza las tres redes de potencia de los EEUU), posibilitan el actual sistema GPS (filtros y cavidades resonantes en sus satélites); qbits de los dos ordenadores cuánticos en la explotación a día de hoy (D-Wave de Google, Q de IBM)...aunque probablemente el más útil uso actual de dichos materiales sean los sensores de campo de los scanners hospitalarios, que llevan décadas siendo un instrumento esencial en la lucha contra el cáncer, y que se basan en su inmensa mayoría en sensores superconductores microestructurados (sensores SQUID).

Es evidente que en otras aplicaciones de la ecuación GL como en estudios de mercados económicos también es relevante el estudio de medios no uniformes, que reflejen la no uniformidad de las características económicas (entre países, ciudades, etc.).

En el caso general, los parámetros del medio que podemos hacer dependientes de \vec{r} y que entren en el enunciado de la ecuación GL sería $a_0(\vec{r})$, $\varepsilon(\vec{r})$, $b(\vec{r})$ y $\xi(0)(\vec{r})$. Nótese que como $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$, considerar $\varepsilon(\vec{r})$ equivale a considerar $T_c(\vec{r})$. Este último es precisamente el caso más estudiado habitualmente. Así pues escribimos el caso general:

$$a_0(\vec{r})\varepsilon(\vec{r})\phi(\vec{r}) + b(\vec{r})\phi^3(\vec{r}) + a_0(\vec{r})\xi^2(0)(\vec{r})\nabla^2\phi(\vec{r}) = 0 \quad (1.31)$$

y el caso en que solo $\varepsilon(\vec{r})$ es no uniforme

$$a_0\varepsilon(\vec{r})\phi(\vec{r}) + b\phi^3(\vec{r}) + a_0\xi^2(0)\nabla^2\phi(\vec{r}) = 0 \quad (1.32)$$

Evidentemente, sin especificar la dependencia $\varepsilon(\vec{r})$ será imposible resolver en general las ecuaciones anteriores. Aún especificándolas, esta complicación adicional llevará a favorecer a los métodos numéricos como los instrumentos por defecto para la resolución de estas ecuaciones GL generalizadas.

1.3. Ecuaciones GL: Su introducción en la economía

La teoría de los fenómenos críticos, desarrollada en 1937 por Landau, explica naturalmente la universalidad y se dedica a describir tal comportamiento crítico. El problema se convierte en encontrar el punto crítico de un fenómeno crítico.

La gran generalidad de los planteamientos de Landau ha llevado recientemente a su empleo también en ámbitos distintos a los de la física. Recientemente, en 2015, investigadores de la Sorbona de París han presentado en la revista de alto impacto “PLOS ONE” una exitosa modelización GL de la economía de poblaciones en la proximidad del estallido de una burbuja económica. Estos autores emplean la ecuación de Landau para modelizar ese fenómeno crítico en términos de un “parámetro de orden” que da cuenta del balance de las decisiones económicas especuladoras frente a las fundamentadas (ánimo económico

ó “mood” en el original). En esta aproximación, el parámetro de orden es asimilable a los beneficios económicos por unidad de tiempo (salarios), la temperatura es una medida del esfuerzo necesario para producir un bien (de forma que $T = 0$ marca un punto óptimo y $T > 0$ indica el grado de problemas para la marcha económica). Cuando $T > T_c$, la economía entra en crisis, dando lugar a $\psi = 0$ (situación de desempleo, por ejemplo). Dicho orden cambiaría en función de un parámetro de actividad del mercado, llamado “temperatura” en el original por mera analogía con las transiciones de fase en función de la temperatura en física.

Figura 6

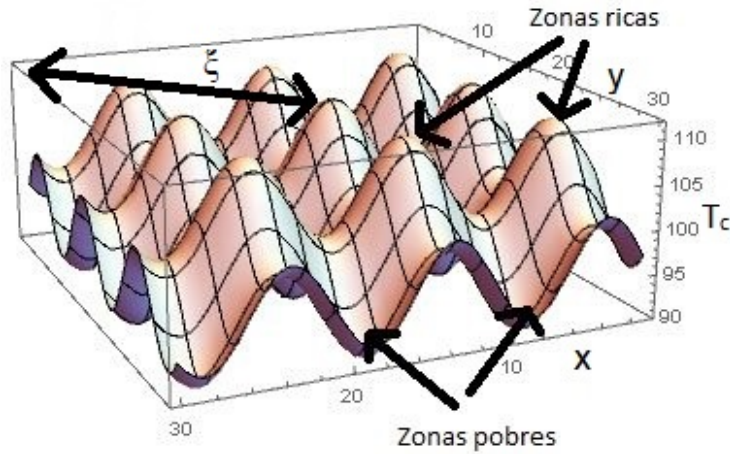


Figura 6: En este trabajo diferenciaremos 2 zonas, unas zonas ricas frente a unas zonas pobres, donde el tamaño de una zona rica es $d=5$, y la longitud de correlación $\xi=2$. Además la figura mostrada está representada para distintas temperaturas. Definiremos la temperatura como el optimismo económico. Debemos tener en cuenta que $T > T_c$ se corresponde a un colapso (crisis) y cuando $T=0$ estamos ante el mayor optimismo. En nuestro caso la temperatura depende de la posición ($T_c(\vec{r})$), es decir, de si estamos en zonas ricas o pobres. Además denotaremos la variable ϕ usada en este trabajo para denotar como las ganancias mensuales, es decir, el sueldo.

En el capítulo 4, describiremos los escenarios estudiados y haremos unos pequeños cambios para ver como se comportaría la economía en las distintas casuísticas. Modificaremos la intensidad del comercio, pasando de moderado a activo, así como también veremos ejemplos donde no consideramos que aplique comercio, modificaremos la “distancia” entre ricos y pobres y veremos a que conclusiones se puede llegar.

Capítulo 2

Soluciones analíticas a un caso sencillo y su discusión: longitud de correlación

En este capítulo vamos a ver un caso concreto simple en el que es posible hallar una solución analítica cerrada para la ecuación Ginzburg-Landau. Esto nos servirá, sobre todo, para introducir el concepto de longitud de correlación (o de coherencia), que será de utilidad para comprender intuitivamente el comportamiento de las soluciones de la ecuación Ginzburg-Landau (tanto en sus casos sencillos como en los más complicados que se abordarán en otros capítulos).

2.1. Ecuación GL $\phi \in \mathbb{R}$ en un medio 1D-uniforme en el caso linealizado $T > T_c$

Consideremos por tanto el siguiente caso:

$$a_0\varepsilon\phi + b\phi^3 - a_0\xi^2(0)\underbrace{\nabla^2\phi}_{\phi''} = 0, \text{ con } \begin{cases} \phi = \phi(x) \\ x \in \mathbb{R} \\ \phi(x) \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (2.1)$$

En el caso de minimizar F es $\phi = \phi_{eq}$; nos preguntamos cuáles serían las desviaciones a primer orden en $\phi - \phi_{eq}$; para ello consideramos el caso en que tachemos de la ecuación todo lo de orden $((\phi - \phi_{eq})^2)$ o superior. En el caso $T > T_c$ ($\varepsilon > 0$) es $\phi_{eq} = 0$, luego lo que hacemos es eliminar $b\phi^3$, es decir, consideramos el caso $b = 0$.

$$a_0\varepsilon\phi - a_0\xi^2(0)\phi'' = 0 \quad (\text{Ecuación GL 1D-linealizado}) \quad (2.2)$$

Esto es una ecuación diferencial ordinaria lineal con coeficientes constantes, de solución trivialmente compuesta por combinaciones lineales de exponenciales. Probaremos pues una solución $\phi_{test} = e^{\beta x}$:

$$\phi_{test} = e^{\beta x}, \phi'_{test} = \beta e^{\beta x}, \phi''_{test} = \beta^2 e^{\beta x} \quad (2.3)$$

$$\phi_{test} \text{ verifica 2.2} \Rightarrow a_0 \varepsilon e^{\beta x} = a_0 \xi^2(0) \beta^2 e^{\beta x} \quad (2.4)$$

que simplificando nos queda algo de la forma:

$$\beta = \pm \sqrt{\varepsilon / \xi^2(0)} \quad (2.5)$$

Así pues las soluciones a 2.2 son las combinaciones lineales

$$\phi = C_+ \exp \frac{x}{\xi(\varepsilon)} + C_- \exp \frac{-x}{\xi(\varepsilon)} \quad (2.6)$$

Donde hemos introducido la “longitud de coherencia GL” como

$$\xi(\varepsilon) \equiv \xi(0) |\varepsilon|^{-1/2} (= \xi(0) \varepsilon^{-1/2} \text{ en nuestro caso en que } \varepsilon > 0) \quad (2.7)$$

Los valores de las constantes C_+ y C_- vendrán dadas por las condiciones de contorno adicionales que impongamos a 2.2. Lógicamente precisamos dos para determinar C_+ y C_- . Consideremos aquí el siguiente caso de condiciones de contorno que nos permitirá además entender el significado de la cantidad $\xi(\varepsilon)$ introducida arriba en términos de su papel en las correlaciones espaciales: Tomamos un material, o dominio de x en el que la ecuación 2.2 sea relevante, formado por $x > 0$. Este es tal que la dependencia de ϕ con y, z es nula y por tanto es un problema 1D. En la frontera del material ($x = 0$) imponemos una condición de contorno sobre ϕ que será

$$\phi(x = 0) = \phi_0 > 0 \quad (2.8)$$

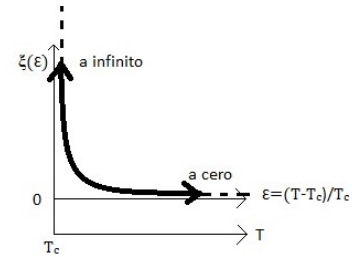
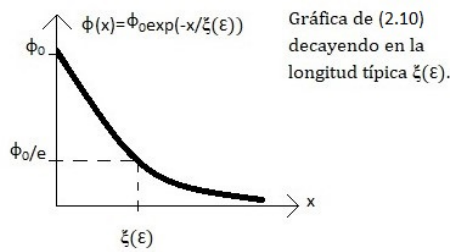
Siendo ϕ_0 una cantidad arbitraria positiva no nula, $\phi_0 > 0$, en general distinta de ϕ_{eq} (que es cero). Dado que esperamos que esa perturbación impuesta en $x = 0$ vaya atenuando sus efectos con la distancia, resulta razonable preguntarse por el caso en que $\phi(\infty) \equiv \lim_{x \rightarrow +\infty} \phi(x)$ vuelva a su valor de equilibrio:

$$\phi(\infty) = 0 \quad (2.9)$$

lo cual será entonces la segunda condición de contorno que impongamos aquí. Eso nos lleva a:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Ecuación 2.6 y 2.9} \Rightarrow C_+ = 0 \\ \text{Ecuación 2.6 y 2.8} \Rightarrow C_+ + C_- = \phi_0 \end{array} \right\} \Rightarrow \phi = \phi_0 \exp \frac{-x}{\xi(\varepsilon)} \quad (2.10)$$

Nótese que es $\phi'(0) = -\phi_0 / \xi(\varepsilon)$ en esa solución.



$$(2.11)$$

2.2. Longitud de correlación ξ

De lo anterior expuesto, observamos el significado de $\xi(\varepsilon)$: Una perturbación, o separación de ϕ del valor ϕ_{eq} , irá decayendo con la distancia al origen de dicha perturbación, exponencialmente, con longitud típica de decaimiento $\xi(\varepsilon)$. A la distancia $\xi(\varepsilon)$ la perturbación habrá disminuido de un factor $\exp(1) = e \approx 2,7$. Así pues, $\xi(\varepsilon)$ es el “tamaño típico de una perturbación” o la distancia típica en que se dan correlaciones espaciales (de ahí su nombre). Es muy relevante la dependencia de $\xi(\varepsilon)$ con ε , o con T , graficada en la figura de la página anterior. Resulta que $\xi(\varepsilon)\alpha|\varepsilon|^{-1/2}$ diverge a ∞ en $\varepsilon \rightarrow 0$ (es decir, a $T \rightarrow T_c$) lo cual se conoce como una “divergencia crítica” e implica que los sistemas se vuelven progresiva (y rápidamente) más rígidos (espacialmente) frente a perturbaciones según se aproximan a un punto crítico o transición de fase ($T = T_c, \varepsilon = 0$).

2.3. Caso 1D-uniforme $\phi \in \mathbb{R}$ en el caso linealizado $T < T_c$

Es también interesante ver el caso linealizado a primer orden en $\phi - \phi_{eq}$ cuando $T < T_c$ ($\varepsilon < 0$). En este caso hemos visto en secciones anteriores que

$$\phi_{eq} = \phi_{eq}^- = \pm \sqrt{\frac{-a_0\varepsilon}{b}} = \pm \sqrt{\frac{a_0|\varepsilon|}{b}} \quad (2.12)$$

Vamos a considerar la linealización en torno a la solución $+\sqrt{\cdot}$, por ejemplo. Así pues consideramos

$$\varphi = \phi - \phi_{eq+}^- = \phi - \sqrt{\frac{a_0|\varepsilon|}{b}} \quad (2.13)$$

y reescribimos la ecuación GL en términos de ese cambio de variable de ϕ a φ . Es fácil llegar a:

$$a_0\varepsilon\varphi + b\varphi^3 + 3b\varphi^2\phi_{eq+}^- + 3b\varphi(\phi_{eq+}^-)^2 - a_0\xi^2(0)\nabla^2\varphi + a_0\varepsilon\phi_{eq+}^- + b(\phi_{eq+}^-)^3 - a_0\xi^2(0)\nabla^2\phi_{eq+}^- = 0 \quad (2.14)$$

Sabemos que ϕ_{eq+}^- verifica la ec. GL, así pues los últimos tres sumandos se anulan entre sí:

$$a_0\varepsilon\varphi + b\varphi^3 - a_0\xi^2(0)\nabla^2\varphi + 3b\phi_{eq+}^-\varphi^2 + 3b(\phi_{eq+}^-)^2\varphi = 0 \quad (2.15)$$

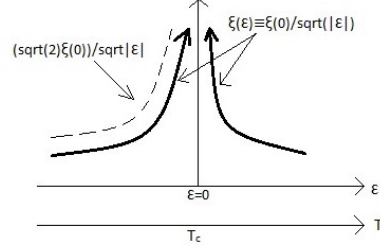
El primer y último sumando restantes pueden agruparse, y como queda dicho estamos interesados en la ecuación lineal en $\varphi (= \phi - \phi_{eq+}^-)$, de modo que la “ec. GL real linealizada $T < T_c$ ” en un medio 1D uniforme queda:

$$\frac{a_0|\varepsilon|}{2}\varphi - a_0\xi^2(0)\nabla^2\varphi = 0 \quad (2.16)$$

Donde ya hemos usado que $(\phi_{eq+}^-)^2 = \frac{a_0|\varepsilon|}{b} \Rightarrow \frac{3b}{2}(\phi_{eq+}^-)^2 = \frac{-3}{2}a_0\varepsilon$ para agrupar el resultado del 1^{er} sumando. Obtenemos, pues, la misma ecuación que para el caso $T > T_c$ salvo por las substituciones $\phi \rightarrow \varphi$ y $|\varepsilon| = (+\varepsilon) > 0 \rightarrow \frac{|\varepsilon|}{2} (= \frac{-\varepsilon}{2}) > 0$

Obviamente, las soluciones para ϕ^+ a $\varepsilon > 0$ son válidas para ϕ^- a $\varepsilon < 0$, sin más que sustituir en $\xi(\varepsilon)$ el ε por $|\varepsilon|/2$.

Así pues $\xi(\varepsilon)$ definido por $\xi(\varepsilon) = \xi(0)/\sqrt{|\varepsilon|}$ conserva su significado de longitud de correlación salvo por una pequeña variación de la rigidez espacial en un factor $\sqrt{2}$:



Enfatizar una vez más uno de los principales resultados de las modelizaciones Ginzburg-Landau: Los sistemas cerca de un punto crítico o transición de estado ($\varepsilon = 0, T = T_c$) se vuelven rígidos (muy correlatado espacialmente, es decir, $\xi \rightarrow \infty$).

Capítulo 3

Resolución numérica de la ecuación Ginzburg-Landau en 2D

Resulta evidente que encontrar una solución analítica cerrada a las ecuaciones Ginzburg-Landau será posible solamente en casos especialmente sencillos, como en el capítulo anterior. La tarea ya se revela imposible en el caso no lineal (término $b\phi^3$ relevante, salvo en casos muy específicos). Pero si además consideramos el caso no lineal no uniforme (función $\alpha(x)$ arbitraria) la dificultad se redobra. De hecho, ha sido un caso muy poco investigado hasta ahora. Aquí ponemos fundamentos para hacerlo: Una novedosa (hasta donde sabemos) expresión discretizada de las ecuaciones, apta para implementar informáticamente.

3.0.1. Discretización y expresión matricial de la ecuación GL

Consideremos el espacio en un mallado rectangular, con constantes de red d_x y d_y y índices de nodo $n = 1..N$ y $m = 1..M$ (Véase siguiente figura), donde el valor de ϕ en cada nodo lo representaremos como $\phi_{m,n}$.

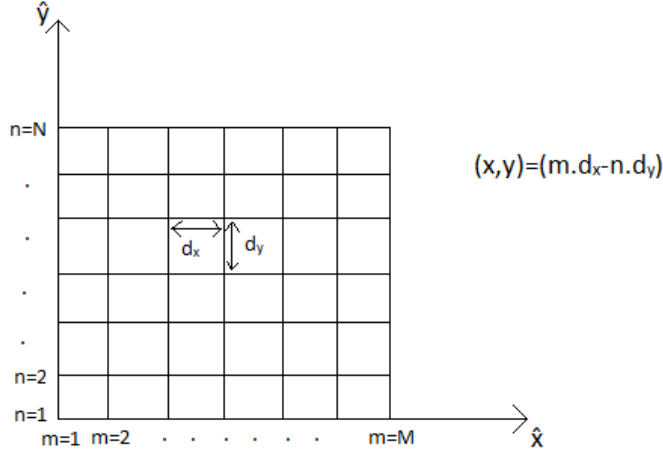
Aproximamos $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ al punto mínimo mediante diferencias finitas a derecha e izquierda, es decir:

$$\partial_x^+ \phi_{m,n} \simeq \frac{\phi_{m+1,n} - \phi_{m,n}}{d_x} \quad (3.1)$$

$$\partial_x^- \phi_{m,n} \simeq \frac{\phi_{m,n} - \phi_{m-1,n}}{d_x} \quad (3.2)$$

$$\partial_{xx} \phi_{m,n} \simeq \frac{\partial_x^+ \phi_{m,n} - \partial_x^- \phi_{m,n}}{d_x} = \frac{1}{d_x^2} [-2\phi_{m,n} + \phi_{m+1,n} + \phi_{m-1,n}] \quad (3.3)$$

Figura del mallado:



Análogamente,

$$\partial_{yy}\phi_{m,n} \simeq \frac{1}{d_y^2}[-2\phi_{m,n} + \phi_{m,n+1} + \phi_{m,n-1}] \quad (3.4)$$

La ecuación GL discretizada pasa a ser entonces

$$\begin{aligned} 0 = & a_{0m,n}\varepsilon_{m,n} + b_{m,n}\phi_{m,n}^3 + \frac{a_{0m,n}\xi_{xm,n}^2(0)}{d_x^2}\{2\phi_{m,n} - \phi_{m+1,n} - \phi_{m-1,n}\} + \\ & + \frac{a_{0m,n}\xi_{ym,n}^2(0)}{d_y^2}\{2\phi_{m,n} - \phi_{m,n+1} - \phi_{m,n-1}\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

$\forall a_0, \varepsilon, b, \xi^2(0)$ dependientes de la posición, y por tanto con subíndice m, n . También $\xi(0)$ lo consideramos como quizás anisotrópico¹ con lo que consideramos $\xi_{xm,n}^2(0)$ y $\xi_{ym,n}^2(0)$. Reagrupando la ecuación anterior de forma mas útil nos quedaría:

$$\begin{aligned} 0 = & \phi_{m,n} \left\{ a_{0m,n}\varepsilon_{m,n} + \frac{2a_{0m,n}\xi_{xm,n}^2(0)}{d_x^2} + \frac{2a_{0m,n}\xi_{ym,n}^2(0)}{d_y^2} \right\} + \\ & + \phi_{m,n}^3 b_{m,n} + \phi_{m+1,n} \left\{ \frac{-a_{0m,n}\xi_{xm,n}^2(0)}{d_x^2} \right\} + \\ & + \phi_{m-1,n} \left\{ \frac{-a_{0m,n}\xi_{xm,n}^2(0)}{d_x^2} \right\} + \phi_{m,n+1} \left\{ \frac{-a_{0m,n}\xi_{ym,n}^2(0)}{d_y^2} \right\} + \\ & + \phi_{m,n-1} \left\{ \frac{-a_{0m,n}\xi_{ym,n}^2(0)}{d_y^2} \right\}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Nótese que esto anterior parece definir un sistema de $M \times N$ ecuaciones con $M \times N$ incógnitas. Ahora bien, en realidad lo escrito no tiene ningún sentido para los casos $m = 1, n = 1$

¹las propiedades varían respecto a la dirección

y $m = M$ y $n = N$. Esto es debido a que en estos casos lo escrito involucra índices desplazados $(m - 1, m + 1, n - 1$ ó $n + 1)$ cuyos valores se salen del rango $1 \leq n \leq N$, $1 \leq m \leq M$. Definiremos lo que significarán para nosotros las cantidades con subíndices $(0, n), (M + 1, n), (m, 0), (m, N + 1)$ para poder considerar las ecuaciones escritas como un sistema de $M \times N$ ecuaciones. Esto es, naturalmente, correspondiente a definir condiciones de contorno en la frontera del dominio de la ecuación diferencial.

Condiciones de Contorno:

Aquí adoptaremos las condiciones de contorno periódicas, o de Dirichlet, como es muy habitual en física, aún advirtiéndole que en el caso general otras opciones serían posibles:

$$\begin{aligned} (0, n) &\equiv (M, n) \\ (M + 1, n) &\equiv (1, n) \\ (m, 0) &\equiv (m, N) \\ (m, N + 1) &\equiv (m, 1) \end{aligned} \tag{3.7}$$

Esto se aplicará a todas las cantidades con subíndices (m, n) . Además, nuestra intención es usar dichas ecuaciones para estudiar, numéricamente, las correlaciones espaciales existentes para distintos casos de $\varepsilon_{m,n}, \xi_{xm,n}^2(0), \xi_{ym,n}^2(0)$, etc. Para ello nuestra forma de proceder será la de reproducir aquellos argumentos que en el caso sencillo 1D uniforme se presentaron antes de forma analítica:

‘Impondremos’ en un punto fijo $(m, n) = (m_0, n_0)$ (Que podrá ser, por ejemplo $(m_0, n_0) = (1, 1)$ o un punto central del mallado) un valor de ϕ_{m_0, n_0} dado, al que llamaremos ϕ_0 . Este valor es una perturbación impuesta, similar a la condición $\phi(x = 0) = \phi_0$ impuesta en el capítulo anterior para introducir la longitud de correlación en el caso 1D uniforme. Matemáticamente, dicha imposición se puede expresar como una condición de contorno, adicional a las de Dirichlet. Así pues, substituiremos entonces en nuestras ecuaciones dicho valor, pasando a ser ϕ_{m_0, n_0} una constante y no una incógnita.

Lógicamente también eliminaremos una ecuación de nuestro sistema de ecuaciones, la que involucra la cantidad ϕ_{m_0, n_0}^3 en el segundo renglón. Tenemos ahora un sistema de $M \times N - 1$ ecuaciones para $M \times N - 1$ incógnitas.

Destaquemos que no se trata de ecuaciones lineales: el término en $\phi_{m,n}^3$ es culpable de ello. La resolución del sistema, así pues, no consiste simplemente en invertir una matriz ni en aplicar una simple operación $\frac{A}{b}$ implementada por varias librerías informáticas existentes.

Como hemos dicho, dado que no es un método fácil de resolver, aplicaremos el **Método de Newton** para dar una aproximación de la solución.

Expresión de la ecuación de GL en cada nodo discretizado:

Vamos a distinguir varias regiones en el mallado de la figura de la página anterior (Figura del mallado), en cada una de las cuales los elementos $D_{mn} f_{m'n'}$ tendrán distinta

expresión, debido a su relación con los contornos. Estas son las regiones de la siguiente figura:

Región F (1,N)	Región B (2,N) (N-1,N)				Región G (N,N)
(1,N-1)	(2,N-1)	.	.	.	(N,N-1)
.
Región D	Región A				Región E
.
(1,2)	(2,2)	.	.	.	(N,2)
Región H (1,1)	Región C (2,1) (N-1,1)				Región I (N,1)

(3.8)

Escribiendo el gradiente discretizado de ϕ cuidadosamente por mera inspección en cada región, y la ecuación GL correspondiente, se llega en el caso general a las siguientes expresiones:

Región A

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{d^2} [-4\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1}] \quad (3.9)$$

Por tanto la ecuación GL en esa región quedaría:

$$a_0 \varepsilon_{i,j} \phi_{i,j} + b \phi_{i,j}^3 - a_0 \xi_0^2 \left\{ \frac{1}{d^2} [-4\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1}] \right\} = 0 \quad (3.10)$$

donde $i=2,\dots,N-1$ y $j=2,\dots,N-1$.

Región B

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{i,N} + \phi_{i+1,N} + \phi_{i-1,N} + \underbrace{\phi_{i,N+1} + \phi_{i,N-1}}_{\phi_{i,1}} \right] \quad (3.11)$$

Por tanto la ecuación quedaría:

$$a_0 \varepsilon_{i,N} \phi_{i,N} + b \phi_{i,N}^3 - a_0 \xi_0^2 \left\{ \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{i,N} + \phi_{i+1,N} + \phi_{i-1,N} + \underbrace{\phi_{i,N+1} + \phi_{i,N-1}}_{\phi_{i,1}} \right] \right\} = 0 \quad (3.12)$$

donde $i=2,\dots,N-1$.

Región C

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{i,1} + \phi_{i+1,1} + \phi_{i-1,1} + \phi_{i,2} + \underbrace{\phi_{i,0}}_{\phi_{i,N}} \right] \quad (3.13)$$

Por tanto la ecuación quedaría:

$$a_0 \varepsilon_{i,1} \phi_{i,1} + b \phi_{i,1}^3 - a_0 \xi_0^2 \left\{ \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{i,1} + \phi_{i+1,1} + \phi_{i-1,1} + \phi_{i,2} + \underbrace{\phi_{i,0}}_{\phi_{i,N}} \right] \right\} = 0 \quad (3.14)$$

donde $i=2, \dots, N-1$.

Región D

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{1,j} + \phi_{2,j} + \underbrace{\phi_{0,j}}_{\phi_{N,j}} + \phi_{i,j+1} + \phi_{1,j-1} \right] \quad (3.15)$$

Por tanto la ecuación quedaría:

$$a_0 \varepsilon_{i,1} \phi_{i,1} + b \phi_{i,1}^3 - a_0 \xi_0^2 \left\{ \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{1,j} + \phi_{2,j} + \underbrace{\phi_{0,j}}_{\phi_{N,j}} + \phi_{i,j+1} + \phi_{1,j-1} \right] \right\} = 0 \quad (3.16)$$

donde $j=2, \dots, N-1$.

Región E

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{N,j} + \underbrace{\phi_{N+1,j}}_{\phi_{1,j}} + \phi_{N-1,j} + \phi_{N,j+1} + \phi_{N,j-1} \right] \quad (3.17)$$

Por tanto la ecuación quedaría:

$$a_0 \varepsilon_{i,1} \phi_{i,1} + b \phi_{i,1}^3 - a_0 \xi_0^2 \left\{ \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{N,j} + \underbrace{\phi_{N+1,j}}_{\phi_{1,j}} + \phi_{N-1,j} + \phi_{N,j+1} + \phi_{N,j-1} \right] \right\} = 0 \quad (3.18)$$

donde $j=2, \dots, N-1$.

Región F

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{1,N} + \phi_{2,N} + \underbrace{\phi_{0,N}}_{\phi_{N,N}} + \underbrace{\phi_{1,N+1}}_{\phi_{1,1}} + \phi_{1,N-1} \right] \quad (3.19)$$

Por tanto la ecuación quedaría:

$$a_0 \varepsilon_{i,1} \phi_{i,1} + b \phi_{i,1}^3 - a_0 \xi_0^2 \left\{ \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{1,N} + \phi_{2,N} + \underbrace{\phi_{0,N}}_{\phi_{N,N}} + \underbrace{\phi_{1,N+1}}_{\phi_{1,1}} + \phi_{1,N-1} \right] \right\} = 0 \quad (3.20)$$

Región G

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{N,N} + \underbrace{\phi_{N+1,N}}_{\phi_{1,N}} + \phi_{N-1,N} + \underbrace{\phi_{N,N+1}}_{\phi_{N,1}} + \phi_{N,N-1} \right] \quad (3.21)$$

Por tanto la ecuación quedaría:

$$a_0 \varepsilon_{i,1} \phi_{i,1} + b \phi_{i,1}^3 - a_0 \xi_0^2 \left\{ \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{N,N} + \underbrace{\phi_{N+1,N}}_{\phi_{1,N}} + \phi_{N-1,N} + \underbrace{\phi_{N,N+1}}_{\phi_{N,1}} + \phi_{N,N-1} \right] \right\} = 0 \quad (3.22)$$

Región H

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{1,1} + \phi_{2,1} + \underbrace{\phi_{0,1}}_{\phi_{N,1}} + \phi_{1,2} + \underbrace{\phi_{1,0}}_{\phi_{1,N}} \right] \quad (3.23)$$

Por tanto la ecuación quedaría:

$$a_0 \varepsilon_{i,1} \phi_{i,1} + b \phi_{i,1}^3 - a_0 \xi_0^2 \left\{ \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{1,1} + \phi_{2,1} + \underbrace{\phi_{0,1}}_{\phi_{N,1}} + \phi_{1,2} + \underbrace{\phi_{1,0}}_{\phi_{1,N}} \right] \right\} = 0 \quad (3.24)$$

Región I

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{N,1} + \underbrace{\phi_{N+1,1}}_{\phi_{1,1}} + \phi_{N-1,1} + \phi_{N,2} + \underbrace{\phi_{N,0}}_{\phi_{N,N}} \right] \quad (3.25)$$

Por tanto la ecuación quedaría:

$$a_0 \varepsilon_{i,1} \phi_{i,1} + b \phi_{i,1}^3 - a_0 \xi_0^2 \left\{ \frac{1}{d^2} \left[-4\phi_{N,1} + \underbrace{\phi_{N+1,1}}_{\phi_{1,1}} + \phi_{N-1,1} + \phi_{N,2} + \underbrace{\phi_{N,0}}_{\phi_{N,N}} \right] \right\} = 0 \quad (3.26)$$

Las anteriores ecuaciones involucran combinaciones de $\phi_{m,n}$ y $\phi_{m',n'}$, con m, n, m' y $n' : 1, \dots, N$. Esto es escribible matricialmente. Así, la parte lineal en los ϕ 's se resume por una matriz de $N^2 \times N^2$ coeficientes, y la parte no lineal (en los ϕ^3) en una matriz $N \times 1$. Si bien un algoritmo puede generar estas matrices (lo que hemos hecho en secciones posteriores, donde se computa $N=30$), para visualizarlo sin embargo es preferible concretar un caso de N .

Ejemplo de la ecuación GL discretizada con $N=4$:

Veamos un ejemplo para el caso $N=4$ en el que mostraremos como serían las regiones y las posteriores matrices obtenidas (útil también para comprobaciones rápidas). En un capítulo posterior veremos un caso con $N=30$, un caso en el que sería impracticable escribir estos desarrollos explícitos.

Consideremos por tanto un caso de 4×4 con varias regiones diferenciadas: Supongamos que $\phi_{i,j} \in \mathbb{R}$, y por tanto, $\phi_{i,j}^3$. La malla a estudiar sería algo de la siguiente forma:

Región F (1,4)	Región B (2,4) (3,4)		Región G (4,4)
(1,3)	(2,3)	(3,3)	(4,3)
Región D (1,2)	Región A (2,2) (3,2)		Región E (4,2)
Región H (1,1)	Región C (2,1) (3,1)		Región I (4,1)

(3.27)

Así pues la ecuación Ginzburg Landau queda:

$$\begin{pmatrix}
\varepsilon_{1,1} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{1,2} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{1,3} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{1,4} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{2,1} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} \\
0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{2,2} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 \\
0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{2,3} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{2,4} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{3,1} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} \\
0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{4\xi^2(0)}{d^2} & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 \\
\varepsilon_{3,2} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{3,3} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 \\
0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{3,4} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} \\
0 & 0 & 0 & \varepsilon_{4,1} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{4,2} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 \\
0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{4,3} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} \\
0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} & \varepsilon_{4,4} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \phi_{1,1} \\ \phi_{1,2} \\ \phi_{1,3} \\ \phi_{1,4} \\ \phi_{2,1} \\ \phi_{2,2} \\ \phi_{2,3} \\ \phi_{2,4} \\ \phi_{3,1} \\ \phi_{3,2} \\ \phi_{3,3} \\ \phi_{3,4} \\ \phi_{4,1} \\ \phi_{4,2} \\ \phi_{4,3} \\ \phi_{4,4} \end{pmatrix}
+ \frac{b}{a_o}
\begin{pmatrix} \phi_{1,1}^3 \\ \phi_{1,2}^3 \\ \phi_{1,3}^3 \\ \phi_{1,4}^3 \\ \phi_{2,1}^3 \\ \phi_{2,2}^3 \\ \phi_{2,3}^3 \\ \phi_{2,4}^3 \\ \phi_{3,1}^3 \\ \phi_{3,2}^3 \\ \phi_{3,3}^3 \\ \phi_{3,4}^3 \\ \phi_{4,1}^3 \\ \phi_{4,2}^3 \\ \phi_{4,3}^3 \\ \phi_{4,4}^3 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}
\quad (3.28)$$

3.0.2. Expresión del método de Newton para la ecuación GL discretizada matricial

Tal y como hemos comentado anteriormente, aplicaremos el **Método de Newton** para dar una aproximación de la solución. Para ello, consideremos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$f_{m,n}\{\phi\} = 0, \begin{cases} 1 \leq n \leq M \\ 1 \leq m \leq M \\ (n, m) \neq (\bar{n}, \bar{n}) \end{cases} \quad (3.29)$$

siendo

$$f_{m,n}\{\phi\} = \phi_{m,n}M_{m,n} + |\phi_{m,n}|^2\phi_{m,n}b_{m,n} + \phi_{m+1,n}D_{1,m,n} +$$

$$+\phi_{m-1,n}D_{2,m,n} + \phi_{m,n+1}D_{3,m,n} + \phi_{m,n-1}D_{4,m,n}. \quad (3.30)$$

$$\text{con} \begin{cases} M_{m,n} = \left\{ a_{0m,n}\varepsilon_{m,n} + \frac{2a_{0m,n}\xi_{xm,n}^2(0)}{d_x^2} + \frac{2a_{0m,n}\xi_{ym,n}^2(0)}{d_y^2} \right\} \\ D_{1,m,n} = D_{2,m,n} = \left\{ \frac{-a_{0m,n}\xi_{xm,n}^2(0)}{d_x^2} \right\} \\ D_{3,m,n} = D_{4,m,n} = \left\{ \frac{-a_{0m,n}\xi_{ym,n}^2(0)}{d_y^2} \right\} \end{cases} \quad (3.31)$$

Notación 3.1. Consideremos \bar{m} y \bar{n} como las condiciones de contorno.

Notación 3.2. Consideraremos el superíndice como el índice de iteración de Newton.

Notación 3.3. Notemos como m, n al mallado espacial.

El método de Newton consiste en considerar la aproximación siguiente:

$$f_{m,n}\{\phi\} \approx f_{m,n}\{\phi^0\} + \sum_{m',n'} (D_{m,n}f_{m',n'})\{\phi^0\}(\phi_{m',n'} - \phi_{m'_0,n'_0}^0) \quad (3.32)$$

siendo

$$D_{m,n}f_{m',n'} = \frac{\partial f_{m',n'}}{\partial \phi_{m,n}} \quad (3.33)$$

una matriz cuadrada en los índices vectoriales (m, n) y (m', n') (ver matriz de la ecuación 3.35) donde cada uno de esos vectores recorre valores de la siguiente forma:

$$(m, n) = (1, 1), (1, 2), \dots, (1, M), (2, 1), (2, 2), \dots, (2, M), (M, 1), (M, 2), \dots, (M, M) \quad (3.34)$$

saltándose el valor (\bar{m}, \bar{n}) en esa sucesión. Análogamente para (m', n') .

Con ello, tenemos:

$$\begin{aligned} Df\{\phi^0\} &= \sum_{m,n=1}^M \sum_{m',n'=1}^N D_{m,n}f_{m',n'}\{\phi^0\} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_{1,1}}{\partial \phi_{1,1}}\{\phi^0\} & \frac{\partial f_{1,1}}{\partial \phi_{1,2}}\{\phi^0\} & \frac{\partial f_{1,1}}{\partial \phi_{1,3}}\{\phi^0\} & \cdots & \frac{\partial f_{1,1}}{\partial \phi_{N,N}}\{\phi^0\} \\ \frac{\partial f_{1,2}}{\partial \phi_{1,1}}\{\phi^0\} & \frac{\partial f_{1,2}}{\partial \phi_{1,2}}\{\phi^0\} & \frac{\partial f_{1,2}}{\partial \phi_{1,3}}\{\phi^0\} & \cdots & \frac{\partial f_{1,2}}{\partial \phi_{N,N}}\{\phi^0\} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{N,N}}{\partial \phi_{1,1}}\{\phi^0\} & \frac{\partial f_{N,N}}{\partial \phi_{1,2}}\{\phi^0\} & \frac{\partial f_{N,N}}{\partial \phi_{1,3}}\{\phi^0\} & \cdots & \frac{\partial f_{N,N}}{\partial \phi_{N,N}}\{\phi^0\} \end{pmatrix} = \\ &= (D_{m,n}f_{m',n'})\{\phi^0\} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Para el Método, intentaremos encontrar un $\{\phi\}$ que haga que f sea equivalente al vector cero, así que elegimos un $\{\phi^1\}$ tal que

$$f_{m,n}\{\phi^0\} + \sum_{m',n'} (D_{m,n}f_{m',n'})\{\phi^0\}(\phi_{m',n'}^1 - \phi_{m',n'}^0) = 0 \quad \forall m, n = 1, \dots, N \quad (3.36)$$

Dado que $D_{m,n}f_{m',n'}$ es una matriz cuadrada, podríamos resolver esta ecuación de la siguiente manera

$$\phi^1 = \phi^0 - (\mathbf{Df}\{\phi^0\})^{-1}\mathbf{f}(\phi^0) \quad (3.37)$$

es decir,

$$\phi_{m,n}^1 = \phi_{m,n}^0 - \sum_{m,n=1}^M \sum_{m',n'=1}^N (Df\{\phi^0\})^{-1} f_{m',n'}\{\phi^0\} \quad \forall m,n \neq \bar{m}, \bar{n}. \quad (3.38)$$

Con eso la ecuación GL $f\{\phi^0\} = 0$ podría, en principio, resolverse hallando la matriz inversa $(Df\{\phi^0\})^{-1}$ y despejando $\{\phi^1\}$.

Pero en la práctica, invertir matrices es computacionalmente oneroso, y no es práctico usar dicho camino directamente.

En vez de ello, procederemos como sigue: Primero resolveremos la ecuación

$$\sum_{(m',n') \neq (\bar{m}, \bar{n})} D_{m,n}f_{m',n'}\{\phi^0\} \Delta^0 \phi_{m',n'} = -f_{m,n}\{\phi^0\} \quad (3.39)$$

tomando $\Delta^0 \phi_{m',n'}$ como su incógnita. Nótese que ya que $D_{m,n}f_{m',n'}\{\phi^0\}$ es una matriz numérica conocida, y $f_{m,n}\{\phi^0\}$ un vector columna numérico conocido, esto se reduce a resolver un sistema de ecuaciones lineales, lo cual es eficiente y preciso computacionalmente.

Una vez conocido el valor de $\Delta \phi_{m',n'}$, podemos obtener la estimación de $\{\phi^1\}$ simplemente por

$$\phi_{m',n'}^1 = \phi_{m',n'}^0 + \Delta^0 \phi_{m',n'} \quad (3.40)$$

Podemos aún mejorar la estimación iterando dicho proceso. Es decir,

a) Empiezo en $i=0$.

b) Resolvemos $\Delta^i \phi_{m',n'}$ de:

$$\sum_{(m',n') \neq (\bar{m}, \bar{n})} D_{m,n}f_{m',n'}\{\phi^i\} \Delta^i \phi_{m',n'} = -f_{m,n}\{\phi^i\} \quad (3.41)$$

c) Calculamos:

$$\phi_{m,n}^{i+1} = \phi_{m,n}^i + \Delta^i \phi_{m',n'} \quad (3.42)$$

d) Incrementamos i en una unidad y volvemos a b).

Además de las condiciones de contorno periódicas, también podíamos utilizar otras condiciones de contorno como pueden ser las condiciones de contorno tipo Neumann o las mixtas. A lo largo de este trabajo, solamente emplearemos las condiciones de contorno periódicas para el desarrollo del problema y su posterior simulación.

Ejemplo de la matriz Df del Método de Newton para $N=4$:

La matriz Df para este caso sería:

$$\begin{pmatrix}
 \varepsilon_{1,1} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,1}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,2}^2 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,4}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,1}^2 & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,1}^2 & \varepsilon_{1,2} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,2}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,3}^2 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,2}^2 & 0 & 0 \\
 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,2}^2 & \varepsilon_{1,3} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,3}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,4}^2 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,3}^2 & 0 \\
 \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,1}^2 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,3}^2 & \varepsilon_{1,4} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,4}^2 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,4}^2 \\
 \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,1}^2 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{2,1} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,1}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,2}^2 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,4}^2 \\
 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,2}^2 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,1}^2 & \varepsilon_{2,2} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,2}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,3}^2 & 0 \\
 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,3}^2 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,2}^2 & \varepsilon_{2,3} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,3}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,4}^2 \\
 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,4}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,1}^2 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,3}^2 & \varepsilon_{2,4} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,4}^2 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,1}^2 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,2}^2 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,3}^2 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{2,4}^2 \\
 \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,1}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,2}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,3}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{1,4}^2 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,1}^2 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,2}^2 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,3}^2 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,4}^2 \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,1}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,2}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,3}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,4}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\varepsilon_{3,1} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,1}^2 & \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,2}^2 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,4}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,1}^2 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,1}^2 & \varepsilon_{3,2} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,2}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,3}^2 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,2}^2 & 0 & 0 \\
0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,2}^2 & \varepsilon_{3,3} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,3}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,4}^2 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,3}^2 & 0 \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,1}^2 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,3}^2 & \varepsilon_{3,4} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,4}^2 & 0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,4}^2 \\
\frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,1}^2 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{4,1} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,1}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,2}^2 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,4}^2 \\
0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,2}^2 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,1}^2 & \varepsilon_{4,2} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,2}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,3}^2 & 0 \\
0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,3}^2 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,2}^2\{\phi^0\} & \varepsilon_{4,3} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,3}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,4}^2 \\
0 & 0 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{3,4}^2 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,1}^2 & 0 & \frac{-\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,3}^2 & \varepsilon_{4,4} + \frac{4\xi^2(0)}{d^2} + \frac{3b}{a_0}\phi_{4,4}^2
\end{pmatrix}$$

Capítulo 4

Simulaciones

En este capítulo vamos a aplicar los desarrollos analíticos e informáticos de los capítulos anteriores para ejecutar algunos ejemplos de resolución numérica de las ecuaciones Ginzburg-Landau no lineales y no uniformes, en algún caso ejemplo que consideramos de interés aplicado. El ejemplo concreto que estudiamos busca modelizar la marcha económica en una región de 900 individuos (30×30 nodos, matriz Df de 899×899 elementos) considerando variaciones espaciales de sus riquezas ($\alpha(\times)$ sinusoidal), y planteando o bien políticas liberales (moderación de las oscilaciones de $\alpha(\times)$) o bien de mercado (incremento de la correlación ξ). Se discutirá si los resultados de una u otra política producen mejores o peores resultados, sobre todo en términos de la renta conseguida para la población más desfavorecida.

4.1. Breve descripción del computador paralelo

Para la simulación de las pruebas, utilizamos una supercomputadora LBTS- epsilon descrita en lbs.usc.es/epsilon con las siguientes características principales:

Una supercomputadora compacta de un solo usuario.

31 Tflops (con precisión FP32)

256 GB de RAM (máx. en placa base)

12000⁺ coprocesadores matemáticos (FPU)

Todo asignado a la investigación del laboratorio LBTS de la Universidad de Santiago (integrado en el grupo de referencia competitiva QMatterPhotonics)

LBTS- epsilon brinda una capacidades de cálculo numérico de vanguardia. La computadora tiene una arquitectura híbrida compuesta por procesadores de CPU (conjunto de instrucciones $x86_{64}$, 64 núcleos distribuidos en tres nodos) más tarjetas GPGPU configuradas como coprocesadores matemáticos (nVidia CUDA, 12288 núcleos en total en tres nodos, una FPU por núcleo). El sistema está optimizado para operaciones matemáticas con una precisión FP32 , en la que ofrece una velocidad de computación máxima de 31 TFlops. (Es capaz de 2.7Tflops con precisión FP64 ; para comparación, un núcleo $x86_{64}$

típico es capaz de aproximadamente 0.01 TflopsFP64 , 0.02 TflopsFP32).

Usamos por tanto la supercomputadora para la implementación del cálculo, así como también usaremos el programa Matemática para la visualización de los resultados, los cuales veremos más adelante.

4.2. Parámetros utilizados

Vamos aplicar nuestras simulaciones del cálculo numérico al caso económico. Definiremos la ecuación utilizada para $\alpha(\vec{r})$ y los parámetros usados para las simulaciones.

Tamaño del sistema

Para nuestras simulaciones usaremos un perfil geográfico de zonas ricas alternadas con zonas pobres, para distintos valores de la diferencia entre pobreza y riqueza (distintos grados de políticas liberales) y de parámetro de correlación entre ellas (distintas intensidades de comercio, esto es, políticas de globalización frente a proteccionistas).

Perfil $\alpha(\vec{r})$ usado

En nuestro caso, decidimos usar una función seno que consideramos que recoge bien las características básicas esperables de la alternancia de zonas ricas y pobres. Tal y como comentamos en el primer capítulo, consideraremos como ricas las zonas altas y como pobres las zonas bajas de la figura (Ver Figura 6). Como ya hemos dicho, la riqueza es expresable en términos de una “temperatura” crítica, o valor crítico de resistencia a crisis.

En nuestro caso, nuestro mapa base a estudiar es el siguiente:

$$\alpha(i, j) = \alpha(\vec{r}) = \frac{(T - T_c)}{T_c} \quad (4.1)$$

con

$$T_c(i, j) = T_c(\vec{r}) = \bar{T}_c + \frac{\delta T_c}{2} \left[\text{sen} \left(\frac{\pi(i-1)}{\lambda} \right) + \text{sen} \left(\frac{\pi(j-1)}{\lambda} \right) \right] \quad (4.2)$$

$$\text{con } \lambda = \frac{L}{2n},$$

donde L es el tamaño horizontal (= vertical) de la región simulada y n es un número entero mayor o igual a 1. $\frac{L}{n}$ será el tamaño de cada zona rica/pobre (tomamos un n tal que $\frac{L}{n} = 5$), \bar{T}_c es el valor crítico promedio, δT_c es la amplitud de la variación del valor crítico, λ la longitud de correlación del valor crítico y tanto i como j varían de 1 a 30, $1 \leq i \leq 30$ y $1 \leq j \leq 30$.

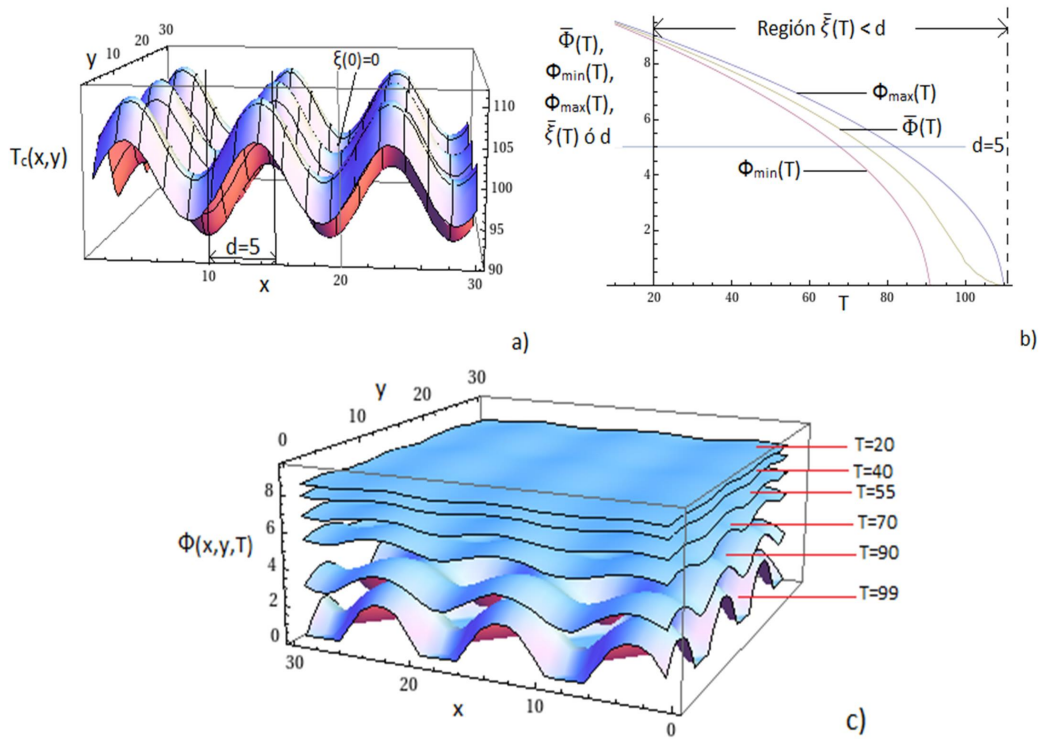
En nuestro caso, será de la forma:

$$T_c(\vec{r}) = 100 + \frac{\delta T_c}{2} \left[\text{sen} \left(\frac{18,84956(i-1)}{30} \right) + \text{sen} \left(\frac{18,84956(j-1)}{30} \right) \right] \quad (4.3)$$

con $1 \leq i \leq 30$ y con $1 \leq j \leq 30$,

y donde nuestro $\frac{\delta T_c}{2}$ tomará en este caso, los valores 5, 5.5 y 6.

Para hacer las representaciones, partimos de la ecuación matricial no lineal de $8,1 \times 10^5$ coeficientes en la matriz de Newton Df . Las iteraciones hasta la convergencia ocupan unos pocos días para cada valor del parámetro T (recordar que $\varepsilon = \frac{T-T_c}{T_c}$). Lo hemos hecho para valores de T de 0 a 100. Para la representación de la gráfica c) cogemos unos pocos valores para visualizar el cambio. Vamos a tomar como referencia el siguiente caso, que es con $\xi = 0$ y con $\frac{\delta T_c}{2}$ tomando el valor 5.



La figura (a) muestra el mapa de $T_c(x,y)$ simulado, señalando con flechas el tamaño característico de los dominios, $d = 5$, y donde vemos también la amplitud de la longitud de correlación, o correlación para $T = 0$, que en este caso toma el valor $\xi(0) = 0$. Esto trasladado a economía, tal y como ya comentamos anteriormente, lo podemos interpretar como una zona donde se distinguen zonas ricas y zonas pobres. En este caso consideramos que los individuos no tienen ningún tipo de vínculo (sin correlación). En la figura (b) mostramos los valores de ϕ con respecto a la temperatura en este caso, así como también los valores de ϕ_{max} y ϕ_{min} . Señalamos además el tamaño del dominio y también el de $\xi(0)$, que como en este caso es 0, toda la región $\xi(0)$ es menor que d y por tanto no existe correlación alguna. Traslado a economía lo podemos visualizar como la resistencia que tienen los individuos a caer en la crisis y vemos como los pobres

(representados como ϕ_{min}) caen antes que los ricos (representados como ϕ_{max}) a causa de que no tienen correlación, es decir, no existe comercio entre ambos. En (c) mostramos el mapa de ϕ para distintos valores de la temperatura. Vemos que a mayor temperatura mayor es la oscilación. Si lo pensamos como movimiento del comercio, vemos que cuanto más vivo está el comercio (mayor temperatura), más diferencias hay entre zonas ricas y pobres, es decir, si hay mucho comercio pero los ricos no comercializan con los pobres (sin correlación), entonces los ricos cada vez son más ricos y los pobres cada vez más pobres.

4.3. Resultados variando la globalización

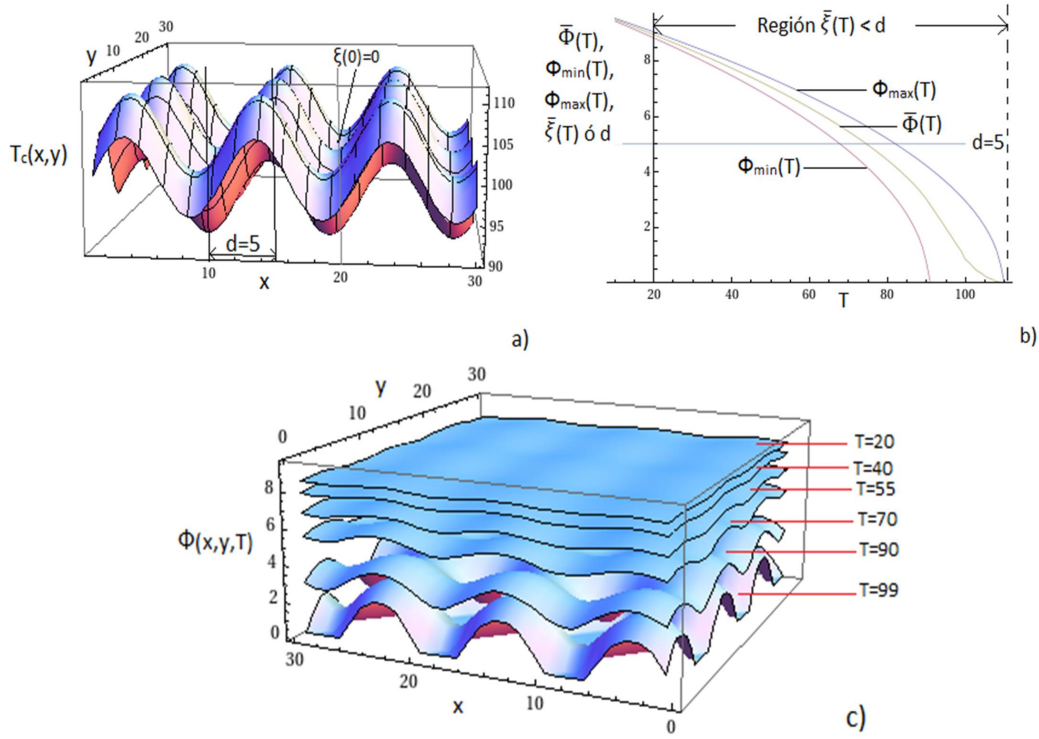
La correlación entre vecinos es $\xi(T) = \frac{\xi(0)}{\sqrt{\varepsilon}}$. La distancia entre zonas ricas y pobres es $\frac{L}{n} = 5$. Cuando $\xi(T) \ll 5$, ricos no comercian con pobres, en cambio, si $\xi(T) \gg 5$, si lo hacen. También el comercio aumenta según nos acercamos a T_c ($\xi(T)$ crece).

4.3.1. Ejemplos de gráficas para las simulaciones obtenidas

Vamos a ver unos ejemplos de gráficas en donde hacemos variar nuestros valores de $\xi(0)$, dándoles los valores 0,1,2 y 3, y mantenemos fijo el valor de $\frac{\delta T_c}{2}$, que en este caso es 5.

Gráficas con $\xi(0) = 0$:

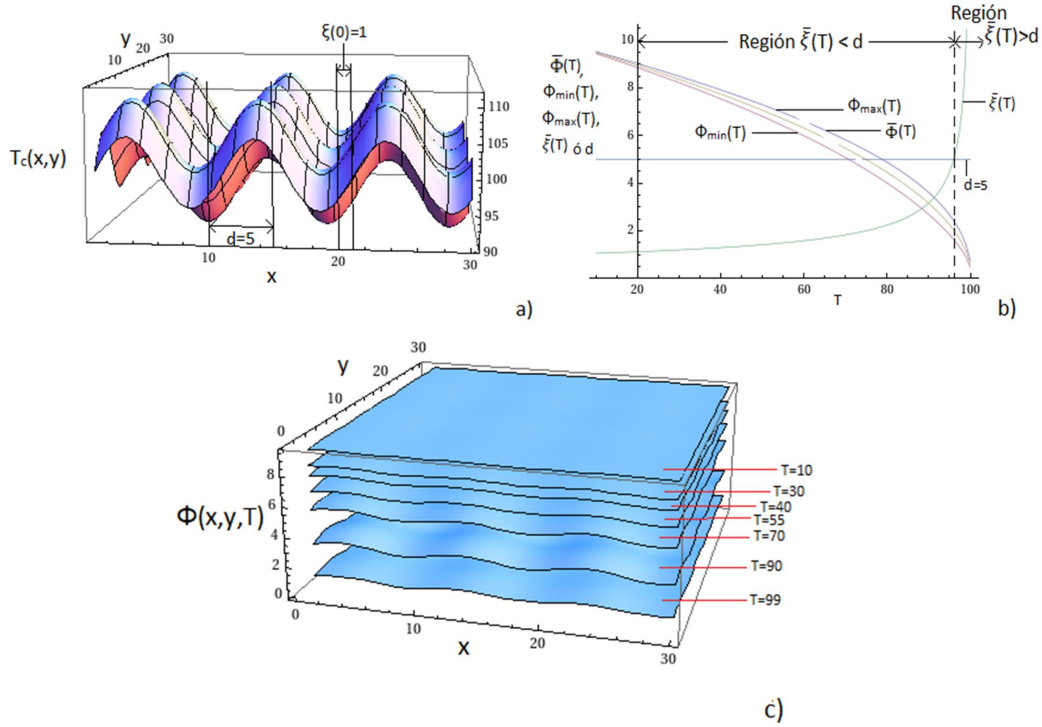
En la figura mostramos una simulación tomando $\phi = 2$ y $\xi(0) = 0$.



En este caso, en términos económicos, en el gráfico b) podemos observar que, dado que los individuos no tienen correlación, no existe comercio entre ricos y pobres, por tanto la resistencia que estos ponen a la crisis es diferente, es decir, los ricos aguantan más que los pobres la crisis. Además, tal y como podemos observar en c), a mayor movimiento de comercio (mayor temperatura), mayor se hace la diferencia entre zonas ricas y pobres.

Gráficas con $\xi(0) = 1$:

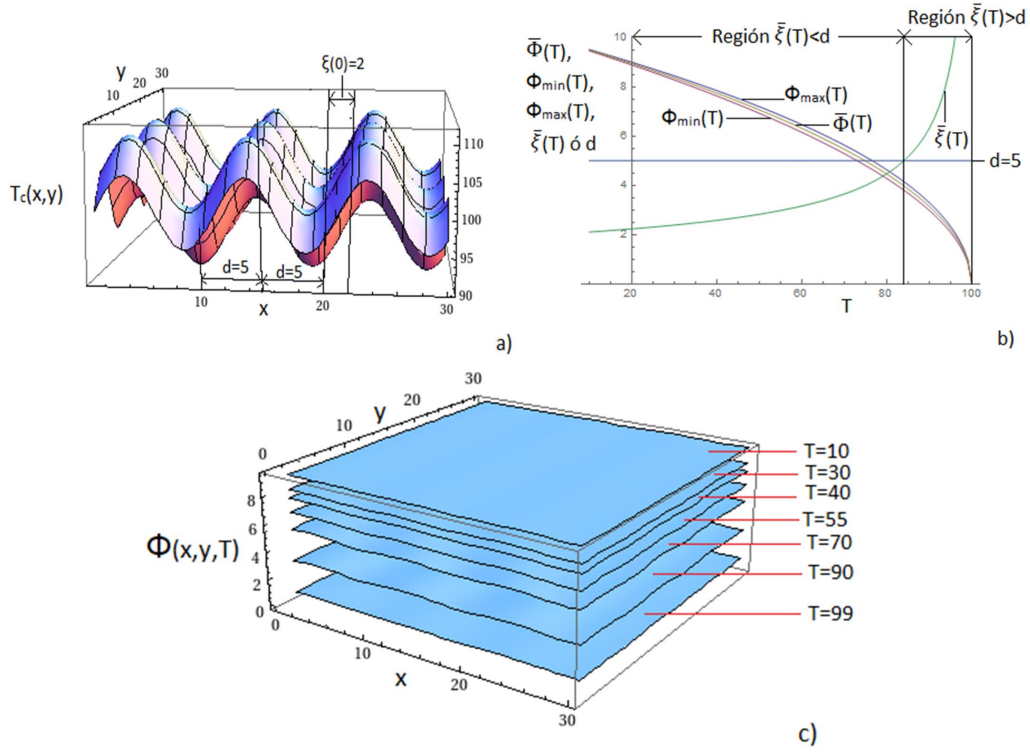
En la figura mostramos una simulación tomando $\phi = 2$ y $\xi(0) = 1$.



Con este nuevo cambio, empezamos a introducir la correlación y por tanto el comercio entre individuos. Este es un caso de “comercio leve”, pero ya podemos observar como, debido a la comercialización entre pobres y ricos, los pobres se ven favorecidos y aguantan más a la crisis. Los pobres se ven beneficiados por el comercio con los ricos. De todas formas, tenemos que llegar casi a zona de crisis para encontrar la correlación entre las zonas. En la figura c) podemos observar que, a pesar de que aumenta el comercio, hay menor variación entre ricos y pobres. Esto se debe a que cuando hay mucho comercio y los ricos comercian con pobres, éstos se ven favorecidos y existen menos diferencias salariales entre los individuos.

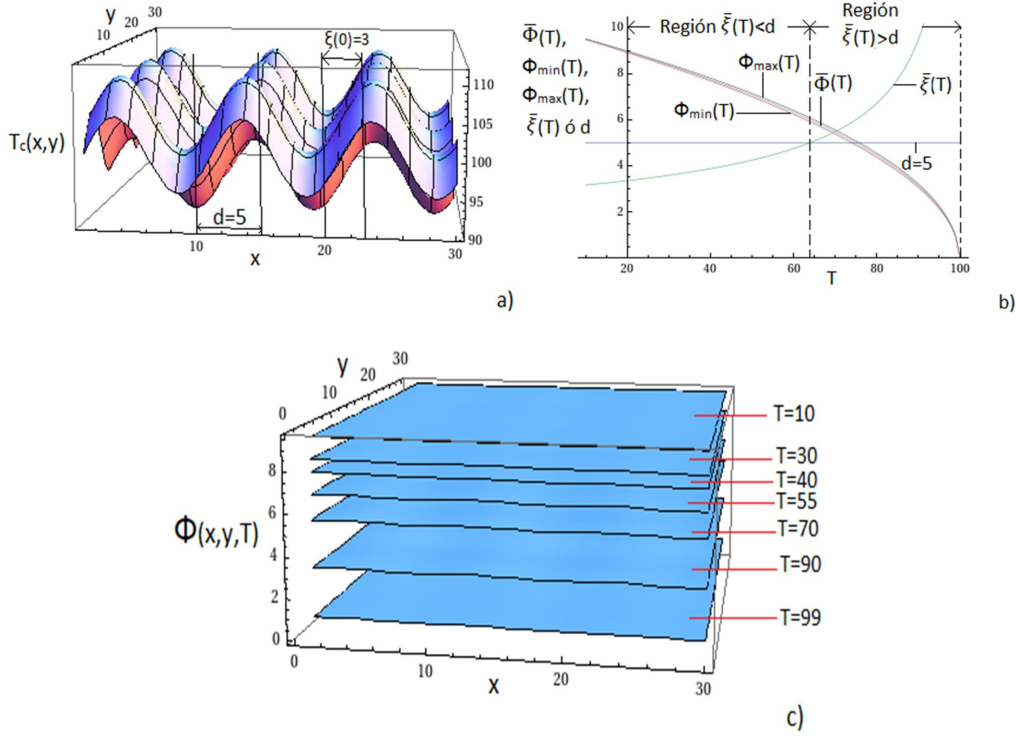
Gráficas con $\xi(0) = 2$:

En la figura mostramos una simulación tomando $\phi = 2$ y $\xi(0) = 2$.



Este es ya un “comercio moderado”, donde existe más correlación entre individuos y por tanto, tal y como se muestra en la gráfica b), los pobres se ven favorecidos por el comercio con los ricos. Ya hay bastante comercialización entre ricos y pobres y por eso son más resistentes a la crisis. Además, a medida que aumenta el comercio, dado que los individuos comercian entre sí, los pobres se ven favorecidos y por tanto no existe tanta brecha salarial entre ambos. Esto se puede observar en la gráfica c), pues aunque el comercio sea elevado, las diferencias entre zonas ricas y pobres son escasas.

Gráficas con $\xi(0) = 3$:



En este caso empezamos a considerar ya un “comercio más intenso”, en el que ricos y pobres comercian ya bastante, por lo que la brecha salarial apenas se percibe. En esta situación las zonas son prácticamente igual de resistentes a la crisis. Además, existe correlación entre ricos y pobres bastante antes de llegar a la zona de crisis. Observamos además en la gráfica c) como, a pesar de aumentar el comercio, no existen diferencias entre zonas ricas y pobres.

4.3.2. Comparación entre distintas simulaciones y discusión

Como podemos observar en la simulación, haciendo variar el parámetro de correlación entre las zonas ricas y las pobres, vemos que a medida que aumentamos el comercio entre individuos, la economía se va igualando. Esto se puede observar como la vida misma, ya que cuando la economía va bien, la clase pobre alcanza la clase media y hay menos diferencias entre ricos y pobres, pero cuando estamos en crisis, los ricos se hacen más ricos y los pobres más pobres.

4.4. Resultados para los efectos de una política liberal

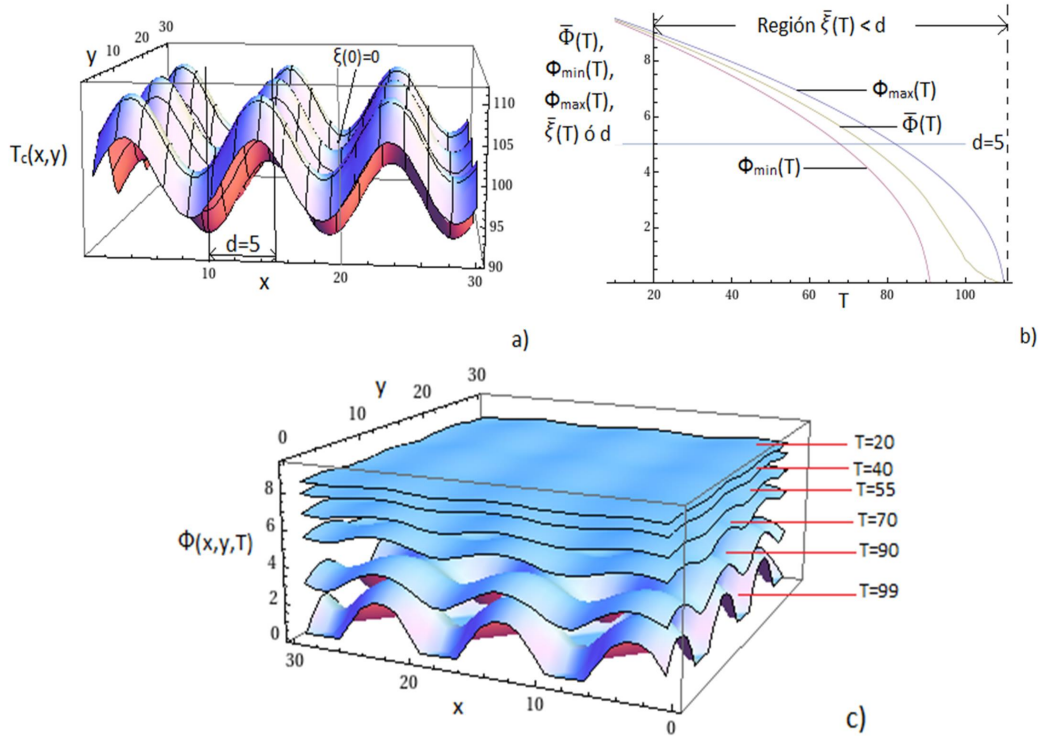
Vamos ahora a considerar una política liberal, sin comercio entre individuos (sin correlación), pero aumentando las diferencias entre ricos y pobres, es decir, empezamos considerando una brecha salarial menor y vamos aumentando la diferencia para ver que ocurre.

4.4.1. Ejemplos de gráficas para las simulaciones obtenidas

En esta sección vamos a fijar el valor de $\xi(0) = 0$ y a variar el valor de $\frac{\delta T_c}{2}$ entre 5 y 6. Veamos el ejemplo con 5 (ya visto en el apartado anterior), 5.5 y con 6.

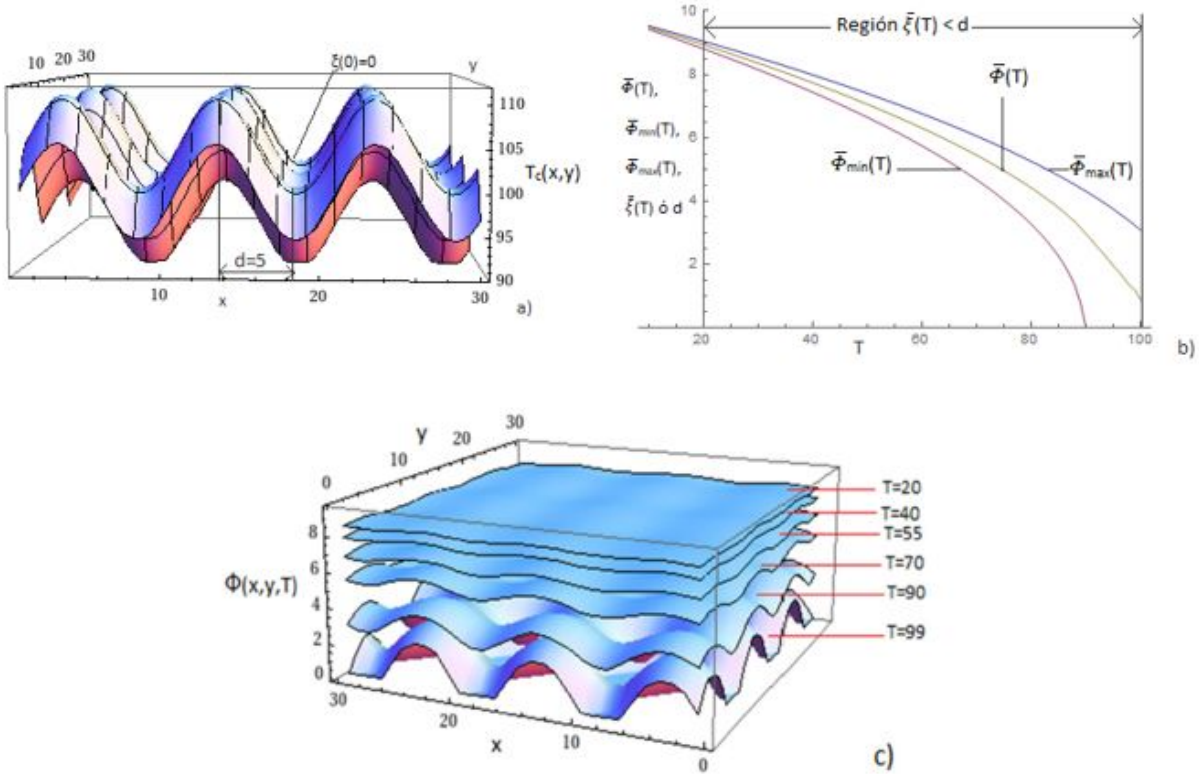
Gráficas con $\frac{\delta T_c}{2} = 5$

En la figura mostramos una simulación tomando $\frac{\delta T_c}{2} = 5$ y $\xi(0) = 0$.



Aquí estamos en la “situación base” comentada en el apartado anterior. En este caso, tal y como hemos dicho, consideramos el caso en que los individuos no tienen comercio entre sí, y por lo tanto, en época de crisis, los ricos son más resistentes a la crisis que los pobres.

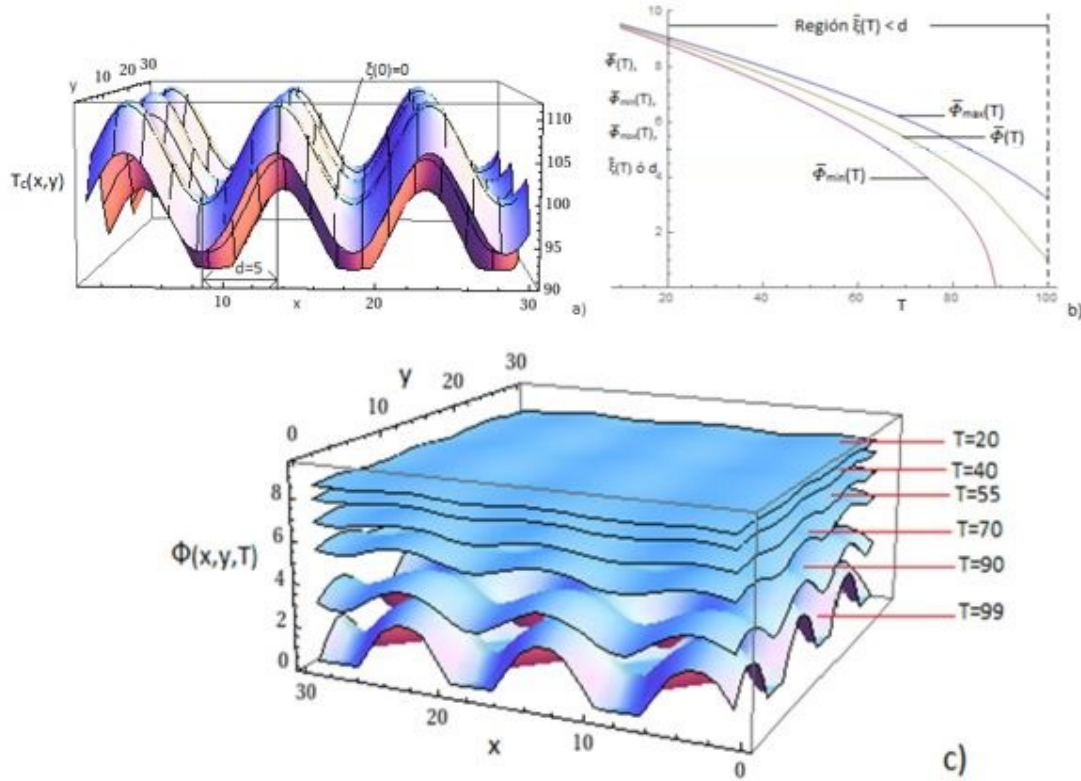
Gráficas con $\frac{\delta T_c}{2} = 5,5$



En este caso hemos aumentado la distancia entre zonas ricas y zonas pobres, es decir, hemos aumentado la brecha salarial. Vemos que, al igual que en el anterior caso, a pesar de aumentar las diferencias, como no hay comercio entre individuos ni correlación alguna, los pobres serán menos resistentes a la crisis ya que no se ven influenciados por los ricos.

Por tanto vemos en b) como se van antes a la crisis los pobres, así como también podemos observar en c) que a medida que aumentamos el comercio, los ricos se hacen más ricos y los pobres más pobres, es decir, a medida que aumenta el comercio, las diferencias entre zonas ricas y pobres aumentan.

Gráficas con $\frac{\delta T_c}{2} = 6$



De igual forma que comentamos en los anteriores casos, en este caso aumentamos la diferencia entre zonas ricas y pobres y observamos que, al no tener relación de comercio entre las zonas y dado que cada individuo actúa como libre, los pobres no se ven favorecidos por la economía de los ricos y por tanto, los individuos pobres se van a la crisis antes que los ricos, es decir, los pobres son menos resistentes que los ricos. De igual forma que comentamos anteriormente, a medida que aumentamos el comercio aumentan las diferencias entre zonas ricas y pobres.

4.4.2. Comparación entre distintas simulaciones y discusión

Como podemos observar en las simulaciones previamente tratadas, da igual a la distancia a la que se sitúen las zonas ricas y zonas pobres, pues si no existe comercio entre ambas zonas, las zonas pobres se ven más afectadas ante la crisis. Además, al no comercializar entre las zonas, un aumento de comercio provoca que aumente la diferencia aún más entre pobres y ricos.

4.4.3. Conclusión de la simulación

Los resultados de las simulaciones nos demuestran que, siempre en las proximidades de una crisis económica (que es cuando se aplican las ecuaciones) resulta más eficaz para evitar

la aparición de zonas muy pobres, el aplicar políticas de globalización en vez de políticas liberales, pues tal y como acabamos de observar, aumentando la correlación entre las zonas se consigue una economía más igualitaria y una menor diferencia entre zonas ricas y pobres. En cambio, haciendo menor la diferencia entre ricos y pobres, sin correlación entre zonas, no permite que la economía sea más igualitaria.

Bibliografía

- [1] Roberto Savona, Maxence Soumare, JØrgen Vitting Andersen. *Financial Symmetry and Moods in the Market*. Centre d'Economie de la Sorbonne, 2014.
- [2] K.A. Hawick and D.P. Playne. *Numerical Simulation of the Complex Ginzburg-Landau Equation on GPUs with CUDA*. Massey University, New Zealand, 2010
- [3] Stephen J. Gustafson. *SOME MATHEMATICAL PROBLEMS IN THE GINZBURG-LANDAU THEORY OF SUPERCONDUCTIVITY*. University of Toronto, 1999
- [4] J. Rougemont. *Evaporation of Droplets in the Two-Dimensional Ginzburg-Landau Equation*. Université de Genève, Switzerland
- [5] Tian Kuang (Tim) Wu. *Critical phenomena with renormalization group analysis of a hierarchical model of financial crashes*. SIMON FRASER UNIVERSITY, 2012
- [6] Shouhong Wang, Mei-Qin Zhan. *L^p solutions to the time-dependent Ginzburg-Landau equations of superconductivity*. Indiana University, Bloomington, 1997
- [7] Qiang Du. *Numerical approximations of the Ginzburg-Landau models for superconductivity*. Pennsylvania State University, 2005
- [8] Susana Gutiérrez. *Non trivial L^q solutions to the Ginzburg-Landau equation*. University of Birmingham, 2005